Mathematische Analyse von Entwicklungssystemen

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Chemie und Pharmazie
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
PETER NWOYE OGIDI MBAEYI
aus Nigeria

~~1984~~
1983

LIBRARY
OF THE
MUSEUM
OF
COMPARATIVE
ZOOLOGY
AT
HARVARD
COLLEGE

MATHEMATISCHE ANALYSE VON ENTWICKLUNGSSYSTEMEN

DISSERTATION
ZUR ERLANGUNG DES GRADES EINES DOKTORS
DER NATURWISSENSCHAFTEN

DER FAKULTÄT FÜR CHEMIE UND PHARMAZIE
DER EBERHARD-KARLS-UNIVERSITÄT ZU TÜBINGEN

VORGELEGT VON
PETER NWOYE OGIDI MBAEYI
AUS NIGERIA

1984

Für die Anregungen zu dem interessanten Fragenkomplex, das die vorliegende Arbeit motiviert, für die stetige Förderung, und vor allem für die Geduld, die den befriedigenden Abschluß ermöglicht, danke ich Herrn Prof. Friedrich Franz Seelig.
Diese Arbeit entstand in den Jahren 1978 bis 1981 am Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Tübingen.

Tag der mündlichen Prüfung: 24. November 1983

Dekan:	Prof. Dr. Joachim Strähle
1. Berichterstatter:	Prof. Dr. F. F. Seelig
2. Berichterstatter:	Prof. Dr. O. E. Rössler

ZUSAMMENFASSUNG

DER AUSGANGSPUNKT DIESER ARBEIT BILDET DER SEELIGSCHE UNIVERSAL-OSZILLATOR, DER DURCH FLIP-FLOP-VERHALTEN GEKENNZEICHNET IST. EINE VERKETTUNG DIESER OSZILLATOREN, FÜR DIE DIFFUSION UND PERMEATION ANGENOMMEN WIRD, SOLL ALS REPRÄSENTATIVE DARSTELLUNG DER NERVENFASER VERSTANDEN WERDEN. UNTERSUCHT WIRD FOLGENDER FRAGENKOMPLEX: KANN EIN CHEMISCHES SYSTEM SO KONDITIONIERT WERDEN, DASS ES GEDÄCHTNISABHÄNGIGES VERHALTEN AUFWEIST ? (GEDÄCHTNISABHÄNGIGES VERHALTEN BEDEUTET DYNAMISCHES VERHALTEN, DAS GANZ ODER TEILWEISE VON VERGANGENEM VERHALTEN ABHÄNGT).

MIT DEM VORSCHLAG EINER DEN FUNKTIONELLEN ASPEKTEN DES AXONS NACHGEBILDETEN INTEGRIERTEN SCHALTUNG (NEURONICS-I GENANNT) WIRD DIESE FRAGE BEJAHT UNTER FOLGENDEN BEDINGUNGEN BZW VORAUSSETZUNGEN:

1. DAS DIFFUSIONSKONZEPT WIRD IN DER VOM VERFASSER VORGESCHLAGENEN WEISE ERWEITERT UND VERALLGEMEINERT (VGL. 'MATHEMATICAL MODELS OF STABLY EVOLVING COMPLEXITIES: I - GROWTH AND DEVELOPMENT AS (M-N) SPECIES DIFFUSION PROBLEM, 1978). DADURCH WIRD A) DER BEGRIFF DES SCHWELLENZUSTANDES EINES EVOLUTIONSPROZESSES PRÄZISIERT, UND B) DIE KLASSISCHE BROWNSCHE DIFFUSION ZUM SPEZIELFALL (GEGEBEN NUR DURCH DEN SCHWELLENZUSTAND).

2. ALS BESTIMMENDE FAKTOREN FÜR DIE BILDUNG DER GEWÜNSCHTEN STRUKTUREN WERDEN UNTER ANDERENEN WELLENGRUPPENVERHALTEN UND PERIODISCHEN RANDWERTPROBLEME HERANGEZOGEN.

3. VERHALTENSVERÄNDERUNGEN, VERSTANDEN ALS DIE STETIGE TRANSFORMATIONEN DER MENGE DER SCHWELLENZUSTÄNDE IN SICH, WERDEN ZURÜCKGEFÜHRT AUF
   A) DIFFERENTIALGLEICHUNGEN, DIE VERÄNDERLICHEN OPERATOREN ENTHALTEN, UND
   B) EIN BIFURKATIONSPROBLEM, DAS (VOM VERFASSER) ALS 'VERALLGEMEINERTES HOPF-MALKINSCHES PROBLEM' BEZEICHNET WIRD.

4. DIE MATHEMATISCHEN PROBLEME WERDEN ZUSAMMENFASSEND DARGESTELLT ALS STEUERUNGSPROBLEME, BEI DENEN RANDWERT- IN ANFANGSWERT-STEUERUNGEN ÜBERGEHEN ('BOUNDARY VALUE CONTROLS INTO INITIAL VALUE CONTROLS').

5. DIE NÜMERISCHEN COMPUTER-MODELLE, ALS PARALLELVERARBEITUNGSMODELLE KONZIPIERT, WERDEN FÜR DIE SUCHE NACH BESTIMMTEN STRUKTUREN ENTWICKELT, WOBEI SPEZIELLEN FUNKTIONEN (VORWIEGEND CHEBYCHEFF POLYNOME) HERANGEZOGEN WERDEN. DABEI STEHEN DIE AUSNUTZUNG DER REKURSIVEN, ORTHOGONALEN UND ANDEREN ALGEBRAISCHEN EIGENSCHAFTEN IM VORDERGRUND.

DIE BEIDEN ERSTEN BEDINGUNGEN BZW. VORAUSSETZUNGEN WERDEN ZUSAMMEN MIT EINER REIHE VON FRAGEN ZUR BIOLOGISCHEN EVOLUTION IM 1. TEIL DER ARBEIT BEHADELT, WÄHREND DEN LETZTEN DREI DER ZWEITE, IM ENGEREN SINNE MATHEMATISCHE TEIL DER ARBEIT GEWIDMET IST. EIN FLUSSDIAGRAM FÜR DAS HIER GEWONNENE PARALLELVERARBEITUNGSMODELL IST IN KAPITEL 5 ANGEGEBEN; ER DIENT ALS BASIS FÜR DIE ENTWICKLUNG VON MUSTERPROGRAMME, ZWECKS UNTERSUCHUNG VON ULTRASTRUKTUREN IN REAKTIONS-DIFFUSIONS-PROZESSEN.

INHALT

		Seite
	Bezeichungen und Symbole	1
1.	EINFOHRUNG	5
	1.1 Problemstellung und einleitende Oberblicke	
	1.2 Ergebnisse	12
	1.2.1 Konstruktion einer einheitlichen mathematischen Theorie für chemische Laser	
	1.2.2 NEURONICS-I: Modell Kette Seeligscher Oszillatoren als Informationsprozessor	
	1.3 Aufbau der Arbeit und methodische Ansätze	15
	I. TEIL: MODELLTHEORETISCHE VORAUSSETZUNGEN FOR CHEMISCHE ENTWICKLUNGSSYSTEME (Grundlage für Gedächtnisvorgänge)	
	Zusammenfassung von Teil I	18
2.	ALLGEIMEINE VORBEREITUNGEN	20
	2.1 Modelltheoretische Probleme kooperativer Phänomene	
	2.1.1 Charakteristiken kooperativer Phänomene	
	2.1.2 Umrisse der Darstellungsprobleme kooperativer Prozesse	21
	2.1.3 Bemerkungen zu Datenbasen für Modellkonstruktion kooperativer Prozesse	23
	2.1.4 Anwendung: Chemische Elementarprozesse aus der Sicht meßtechnischer Erfassung kooperativer Prozesse	35
	2.2 Allgemeine Voraussetzungen aus der Sicht nichtlinearen Formulierungen von Evolutionsproblemen	42
	2.2.1 Wesentliche Elemente nichtlinearer Evolutionsprobleme	
	2.2.2 Diffusions- und Relaxationskoeffizienten als (kontroll-)Parameter von Evolutionsvorgängen	58
	2.2.3 Gedächtniskonzepte und -Typen (in der Evolution)	70
	2.2.4 Gedächtnisoperationen: NRZ-Modus und diffusionsabhängige Gedächtnisprägung	72
	2.2.5 Flip-Flops als ein Grundprinzip der Evolution	75
	2.3 Transformation und Erweiterung des Seeligschen Modells mittels nichtlinearer Evolutionstheorie	80
	2.3.1 Einführende Beispiele - 'Oregonator' Modell und andere pulsierte chemische Kinetiken	

Seite

2.3.2 Hilfsbeispiel: Nervenfaser mit Ergänzungen zu existierenden Modellen 84
2.3.3 Nichtlineares Evolutionsmodell der Problemstellung 92
2.4 Elemente der Laserphänomenologie 108
2.4.1 Grundprinzip
2.4.2 Lasertypen 111
2.4.3 Ladungstransportbauelement (CTD - 'Charge Transfer Devices') 113
2.4.4 CTD und Informationsverarbeitung 115
2.4.5 Das Schreiben und Lesen eines CTD 119
2.5 Eine 1-dimensionale Kette Seeligscher Oszillatoren als Bausteine chemischer Laser 121
2.5.1 Grundprinzipien chemischer Laser
2.5.2 Eine 1-dimensionale Kette Seeligscher Oszillatoren im Spiegel der Nervenfaser 127
2.5.3 NEURONICS-I: Modell eines elementaren IC-Chips 130
2.5.4 Chemische Reaktionskinetik als Informationsträger 139
2.5.5 Das Schreiben und Lesen eines biochemischen Systems im RNZ-Modus 140
3. WEGE ZUR GEDÄCHTNISPRÄGUNG DURCH REAKTIONS-DIFFUSIONS-SYSTEME
3.1 Gedächtnis durch periodische Strukturen 145
3.1.1 Randwertprobleme von Evolutionssystemen mit Schwellenzustandserscheinungen
3.1.2 Allgemeine Verkettungsprobleme bei saltatorischer Diffusion 148
3.1.3 Spezielle Verkettungsfälle - Periodische Strukturen am Beispiel Nervenfaser 152
3.2 Spezielle Lösungen für Evolutionssysteme: 'Solitary Waves' usw 156
3.3 Wege zur Konditionierung eines adaptiven Systems: Entwicklungsfähige Systeme 158
3.4 Definitionen zulässiger Steuerungsfunktionen für chemische Evolutionsprozesse 162

II. TEIL: MATHEMATISCHE ANALYSE VON ENTWICKLUNGSSYSTEMEN
Zusammenfassung von II. Teil 166
4. QUALITATIVE VERHALTEN VON ENTWICKLUNGSSYSTEMEN 168

Seite

4.1 Existenz und Stabilität von Modellgleichungen. 168
4.2 Das Hopf-Malkinsche Problem für Entwicklungssystme 176
4.2.1 Eigenwertprobleme der gewünschten Zustände 177
4.2.2 Die durch Eigenwerte definierte Transformationen für Entwicklungssysteme 184
4.2.3 Periodische Lösungen der durch Eigenwertprobleme abgeleiteten Zustandsgleichungen 187
4.3 Entwicklungssysteme als Systeme mit veränderlichen Operatoren: Lösbarkeit und Stabilität 191
4.4 Ebene Wellen und elliptische Funktionen für biochemische Systeme 198
4.5 Das Sturm-Liouvillsche Problem für Entwicklungsmodelle 203

5. ZUR NUMERIK DER MODELLGLEICHUNGEN UND ENTWURF VON SIMULATIONSMODELLEN
5.1 Die zu betrachtenden Gleichungen
5.1.1 Die Grundgleichungen 208
5.1.2 Die Erneuerungsgleichungen 210
5.1.3 Gewünschte Lösungsformen und die abgeleitabgeleiteten Gleichungen 213
5.1.4 Alternativer Weg zur periodischen Lösung gewöhnlicher DGLen 217
5.1.5 Zur Abbildung von $\omega \cdot x - \nu t$ auf $[0, 1]$ 221
5.2 Andere Hilfsbetrachtungen
5.2.1 Die Steuerungsprobleme der erstrebten Konditionierung 223
5.2.2 Explizite Formen für veränderlichen Diffusions- und Relaxationskoeffizienten 224
5.2.3 Erweiterung der nichtlinearen Gliedern in Simulationsmodellen 230
5.2.4 Grundformen der anzuwendenden Impulse 232
5.3 Simulationsmodelle
5.3.1 Die Konditionierungsvorgänge 233
5.3.2 Iterationsverfahren für die abgeleiteten gewöhnlichen DGLen 240
5.3.3 Iterationsverfahren für die abgeleiteten IGLen der erneuerbaren Entwicklungssysteme 245
5.3.4 Abrisse des Flußdiagrams für eine Simulation 250

Seite

5.4 Interpretationen und Ausblicke
5.4.1 Ausblicke zur theoretischen Grundlage 256
5.4.2 Ausblicke zur direkten Lösungsmethode 256
5.4.3 Ausblicke zur numerischen Simulation biochemischer Evolutionsmodelle 257
5.4.4 Vergleiche und Interpretationen 258

ANHANG: WICHTIGE MATHEMATISCHE HILFSMITTEL
A1. Dynamische Systeme und Automata: Definitionen und wichtige Eigenschaften 260
A2. Die Sturmsche Theorie für gewöhnliche DGLen 264
A3. Die Transformation von DGLen in IGLen 266
A4. Das Prinzip der Erzeugenden Funktionen 268

LITERATURVERZEICHNIS
A Allgemeiner Teil 271
B Über (hierarchische) Modellierung kooperativer Phänomene unter Berücksichtigung endlicher Mengen 274
C Über Schwellenzustände und deren Erhaltung in der Evolution und Darstellung durch spezielle Wellenformen 277
D Über Transportkoeffizienten und Raumeffekte in Diffusionsprozessen 279
E Über Laser und Informationsverarbeitung mit CTD 282
F Über Differential- und Operatorengleichungen 285
G Über orthogonale Funktionen in der Numerik nichtlinearen Systeme und Informationsverarbeitung 286
N Nachtrag 288

NACHWORT 290

LEBENSLAUF 291

BEZEICHNUNGEN UND SYMBOLE

$\mathbb{N}$ - Menge der natürlichen Zahlen $\{1,2,3,.....\}$

$\mathbb{N}^\circ$ - $\mathbb{N} \cup \{0\} \triangleq \{0,1,2,3,.....\}$

$-\mathbb{N}$ - Menge der negtiven Zahlen $\{....,-3,-2,-1\}$

$\mathcal{J}$ - $\mathbb{N}^\circ \cup \{-\mathbb{N}\}$:Menge der ganzen Zahlen

$\mathbb{Q}$ - Menge der rationalen Zahlen: $q \in \mathbb{Q} \Rightarrow q = g_1 g_2^{-1}$, $g_1, g_2 \in \mathcal{J}$

$\mathbb{R}$ - Menge der reellen Zahlen

$\mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ - Menge der irrationalen Zahlen

$\bar{\mathbb{R}}$ - $\mathbb{R} \cup \{\infty\}$: Ein-Punkt-Kompaktifizierung der reellen Achse

$\mathbb{R}^+$ - Menge der positiven reellen Zahlen

$\mathbb{R}^-$ - Menge der negativen reellen Zahlen

$\mathbb{C}$ - Der 1-dimensionale komplexe Raum $\mathbb{R} \times i\mathbb{R}$ $i^2 = 1$; $z \in \mathbb{C}$, $z = x + iy$, $x, y \in \mathbb{R}$.

$\mathbb{R}^d / \mathbb{C}^d$ - d-dimensionaler reeller/komplexer Raum

$\mathbb{R}_t$ - Zeitachse

$\mathbb{R}_t^+ / \mathbb{R}_t^-$ - Positive/negative Zeitrichtung

$\Omega \subset \mathbb{R}^d$ - Teilraum des d-dimensionalen (reellen) Raums

$\partial\Omega$ - Rand von Ω

$\bar{\Omega}$ $\Omega \cup \partial\Omega$

$(\cdot,\cdots,\cdot) / (\cdot,\cdots,\cdot)^T$ Vektor/ Transponierter Vektor

$Y' \in \mathbb{R}^d$ $Y' = (Y'_1, \cdots, Y'_d)^T$

$(Y')^T \cdot Y''$ - Skalares Produkt: $Y'_1 \cdot Y''_1 + \cdots + Y'_d \cdot Y''_d$

$\|\cdot\|_{\mathbb{R}^d}$ - Norm : $\|Y'\|^2_{\mathbb{R}^d} = (Y'_1)^2 + \cdots + (Y'_d)^2$

$Y' \equiv Y'(x,t)$ $\Omega \times \mathbb{R}_t \longrightarrow \mathbb{R}^{d'}$, $d' \geq 1$, $t \in \mathbb{R}_t$

$\Omega \subset \mathbb{R}^{d'}$, $d' \geq 1$

MENGENBEZEICHNUNGEN:

$\mathcal{A}$ - Menge der Anfangswerte

$\mathcal{B}$ - Menge der Randwerte

$B \subset \mathcal{B}$ - Untermenge der Menge der Randwerte

$b \in B$ - Randwertelement

$\mathcal{U}$ - Menge zulässiger Steuerungsfunktionen

$U \in \mathcal{U}$ - Untermenge der Menge der Steuerungsfunktionen

$u \in U$ - zulässiges Steuerungselment

$\mathcal{S}$ - Zustandsmenge (State Space Set')

$S \in \mathcal{S}$ - Untermenge der Zustandsmenge

- Zustandselement

ABKORZUNGEN:

LTM	-	Langzeitgedächtnis ('Long Term Memory')
STM	-	Kurzzeitgedächtnis ('Short Term Memory')
RZ	-	Return to Zero Modus
NRZ	-	Non-Return-to-Zero
DGL(en)	-	Differentialgleichung(en)
IGL(en)	-	Integralgleichung(en)
AWP	-	Anfangswertproblem ('IVP - Initial Value Problem')
RWP	-	Randwertproblem ('BVP - Boundary Value Problem')
CPW	-	Wellen mit konstanten Profilen ('Constant Profiel Waves')
SOWA-Wllen	-	'Solitary Waves'
SW-Wellen	-	Stehende Wellen ('Standing Waves')
TW-Wellen	-	Laufende Wellen ('Travelling Waves')

EINIGE HIERARCHIE VON (SKALAREN) FUNKTIONEN:

$(\mathcal{E}, \rho) \longleftrightarrow \{(\mathcal{E}_i, \rho_i)\}_{i=1}^{m}$
$\longleftrightarrow \{\{(\mathcal{E}_{ij}, \rho_{ij})\}_{j=1}^{n_i}\}_{i=1}^{m}$

- Eine Hierarchie von skalaren Funktionen; (sie sind durch nichtlineare Interaktionsfunktionen unter einander verbunden

$(\sigma(\mathcal{E}), D(\rho)) \longleftrightarrow$
$\{(\sigma_i(\mathcal{E}_i), D_i(\rho_i))\} \longleftrightarrow$
$\{\{(\sigma_{ij}(\mathcal{E}_{ij}), D_{ij}(\rho_{ij}))\}\}$

- Eine Hierarchie von veränderlichen Diffusionkoeffizienten, entsprechend der obigen Hierarchie skalarer Funktionen

$(\tau_1(\varepsilon), \tau_2(\rho)) \longleftrightarrow$
$\{(\tau_{1i}(\varepsilon_i), \tau_{2i}(\rho_i))\} \longleftrightarrow$
$\{\{(\tau_{1ij}(\varepsilon_{ij}), \tau_{2ij}(\rho_{ij}))\}\}$

– Hierarchie von veränderlichen Relaxationszeiten, entsprechend der obigen Hierarchie skalarer Funktionen

$(\tilde{\tau}_1(\varepsilon), \tilde{\tau}_2(\rho)) \longleftrightarrow$
$\{(\tilde{\tau}_{1i}(\varepsilon_i), \tilde{\tau}_{2i}(\rho_i))\} \longleftrightarrow$
$\{\{(\tilde{\tau}_{1ij}(\varepsilon_{ij}), \tilde{\tau}_{2ij}(\rho_{ij}))\}\}$

– Hierarchie von veränderlichen Refraktierzeiten, entsprechend der obigen Hierarchie skalarer Funktionen

VEKTORFUNKTIONEN:

$N = 2N_1 = 2\left(1 + m + \sum_{i=1}^{m} n_i\right)$

$Z \triangleq (Z_1, \dots, Z_N)^T$ $\quad (\varepsilon, \rho, \varepsilon_1, \rho_1, \dots \varepsilon_m, \rho_m, \varepsilon_{11}, \rho_{11}$
$\dots \varepsilon_{1n_1}, \rho_{1n_1}, \varepsilon_{12}, \rho_{12}, \dots$
$\dots \varepsilon_{m1}, \rho_{m1}, \dots, \varepsilon_{mn_m}, \rho_{mn_m})^T$

$\tilde{\varepsilon}$ $\quad (\varepsilon, 0, \varepsilon_1, 0, \dots, \varepsilon_m, 0, \varepsilon_{11}, 0,$
$\dots \varepsilon_{1n_1}, 0, \varepsilon_{12}, 0, \dots$
$\dots \varepsilon_{m1}, 0, \dots, \varepsilon_{mn_m}, 0)^T$

$\tilde{\rho}$ $\quad (0, \rho, 0, \rho_1, 0, \dots, 0, \rho_m, 0, \rho_{11},$
$\dots, 0, \rho_{1n_1}, 0, \rho_{12}, \dots$
$\dots, 0, \rho_{m1}, \dots, 0, \rho_{mn_m})^T$

SUBSTITUTIONEN FÜR EBENE-WELLEN:

$Z \equiv \psi(\omega \cdot x - \nu t)$ $\quad (\psi_1(\omega \cdot x - \nu t), \dots, \psi_N(\omega \cdot x - \nu t))$
$\tilde{\varepsilon} \equiv \tilde{\psi}_1(\omega \cdot x - \nu t)$ $\quad (\tilde{\psi}_{11}(\omega \cdot x - \nu t), \dots, \tilde{\psi}_{1N}(\omega \cdot x - \nu t))$
$\tilde{\rho} \equiv \tilde{\psi}_2(\omega \cdot x - \nu t)$ $\quad (\tilde{\psi}_{21}(\omega \cdot x - \nu t), \dots, \tilde{\psi}_{2N}(\omega \cdot x - \nu t))$

$\omega \in \mathbb{R}^{d'}, x \in \Omega, \nu \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}_t$

ABLEITUNGEN:

$\xi = \omega \cdot x - \nu t$ - Wellenphaseparameter

$\dot{Z} = \frac{dZ}{d\xi}$ $\quad \left(\dot{Z}_1 = \frac{dZ_1}{d\xi}, \dots, \dot{Z}_N = \frac{dZ_N}{d\xi}\right)$

$\ddot{Z} = \frac{d^2Z}{d\xi^2}$ $\quad \left(\ddot{Z}_1 = \frac{d^2Z_1}{d\xi^2}, \dots, \ddot{Z}_N = \frac{d^2Z_N}{d\xi^2}\right)$

∇Z $\quad e_1 \frac{\partial Z}{\partial x_1} + e_2 \frac{\partial Z}{\partial x_2} + \dots + e_{d'} \frac{\partial Z}{\partial x_{d'}}$

$\triangleq (\nabla Z_1, \dots \nabla Z_N)$

$(e_1, \dots e_{d'})$ Basis in $\mathbb{R}^{d'}$ $\quad \delta_{ll'} = \begin{cases} 0 & l \neq l' \\ 1 & l = l' \end{cases}$

$e_l \cdot e_{l'} = \delta_{ll'}$

$(\nabla Z)^2$ $\quad \left((\nabla Z)^2 = (\nabla Z_1 \cdot \nabla Z_1), \dots (\nabla Z_N)^2\right)$

$\nabla^2 Z = \nabla \cdot \nabla Z$ $\quad \left(\frac{\partial^2 Z}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 Z}{\partial x_{d'}^2}\right)$

$= (\nabla^2 Z_1, \dots, \nabla^2 Z_N)$

- (Laplacescher Operator)

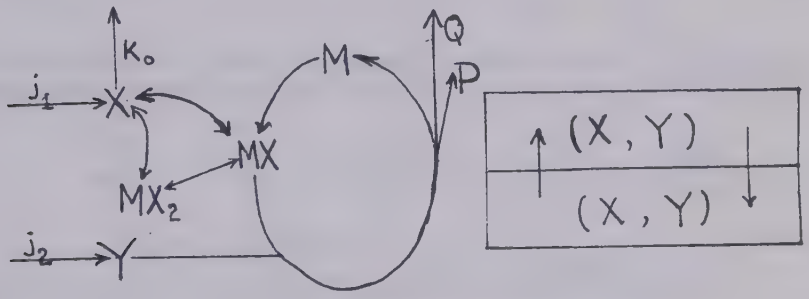
KAPITEL 1

Einführung

1.1: Problemstellung und einleitende Überblicke:

Die Erweiterung einer Reaktionskinetik zu einem Reaktions-Diffusions-Prozess mit gewissen Eigenschaften ist der Gegenstand dieser Untersuchung. Ein Reaktions-Diffusions-Prozess ist eine Reaktionskinetik, die durch Transport von Materie und Energie begleitet wird; es wird fortan angenommen, daß der Transport vorwiegend durch Diffusion geschieht.

Ausgangspunkt dieser Arbeit ist eine oszillierende Reaktion von Seelig, siehe Seelig [A-61](*); sie wird fortan als der SEELIGSCHE UNIVERSALOSZILLATOR bezeichnet, und ist in Abb. 1.1a unten schematisch dargestellt:



(a) (b)

Abb. 1.1

Durch die Einführung folgende Variablen

$$(1.1) \qquad \tau = k_o t \; ; \; \xi = \frac{k_1}{k_{-1}}[X] \; ; \; \eta = \frac{k_4}{k_{-1}}[Y]$$

die festen Parameter

$$(1.2) \qquad \alpha = \frac{k_4}{k_1} \; ; \qquad \kappa = \frac{k_{-1} k_2}{k_1 k_{-2}}$$

und die flexiblen Parameter

$$(1.3) \qquad \phi = \frac{k_1}{k_o k_{-1}} j_2 \; ; \; \chi = \frac{k_1}{k_o k_{-1}} (j_1 - j_2)$$

(*) Zahlen in eckigen Klammern bedeuten Literaturangabne; für die Bedeutung des vorangestellten alphabetischen Zeichen siehe §1.3.

(1.4) $$\gamma = \frac{k_{-1}[M]_{ges}}{j_2}$$

entsteht folgendes System gewöhnlicher Differentialgleichungen (DGLen):

$$\frac{d\xi}{d\tau} = \phi + \chi - \xi - \rho$$

(1.5) $$\frac{d\eta}{d\tau} = \alpha(\phi - \rho)$$

$$\rho = \gamma\phi \frac{\xi\eta}{1 + \xi + \xi^2 + \eta}$$

Bemerkung 1.1: Das Gleichungssystem (1.5)+ wird durch Anwendung der Substitutionen (1.1) bis (1.4) aus folgender Zustandbeschreibung für Abb. 1.1a abgeleitet:

$$\frac{d[X]}{dt} = j_1 - k_0[X] - r \; ; \quad \frac{d[Y]}{dt} = j_2 - r$$

(1.6)
$$r = k_4[Y][MX] = k_{-1}[M]_{ges} \frac{\frac{k_1[X]}{k_{-1}} \cdot \frac{k_4[Y]}{k_{-1}}}{1 + \frac{k_1[X]}{k_{-1}}\left(1 + \frac{k_2[X]}{k_{-2}}\right) + \frac{k_4[Y]}{k_{-1}}}$$

siehe Seelig [A-6] Seite 1128 - 1129.

Zwei solche Reaktionen, jede für sich in einem Kompartment eingeschlossen (Abb. 1.1b), ergeben ein Reaktionssystem mit Kipp-Verhalten (ein FLIP-FLOP - ein bistabiles Element, siehe z.B Jacobowitz E-28), wenn sie durch Permeation zu Interaktion gezwungen werden. Die Interaktion wird durch selektive Zuflüsse durch eine trennende Membran gesteuert; der Prozess der Durchflüsse durch die Membran wird Permeation genannt. Zusätzliche Einflußfaktoren sind die Zuflüsse j_1 und j_2 (Abb. 1.1a), die sich in ϕ und χ (Identitäten (1.3)) im Gleichungssystem (1.5) niederschlagen.
Für zwei Reaktionen, die auf dieser Weise in Verbindung stehen, erhält man folgendes System gewöhnlicher DGLen:

+ Zahlen in runden Klammern beziehen sich auf Verweise innerhalb dieser Arbeit selbst; siehe auch §1.3 für ergänzende Erläuterung

$$
\begin{aligned}
\frac{d\xi_1}{d\tau} &= \phi + \chi - \xi_1 - \rho_1 - \pi_x(\xi_1 - \xi_2) \\
\frac{d\eta_1}{d\tau} &= \alpha(\phi - \rho_1) - \pi_y(\eta_1 - \eta_2) \\
\frac{d\xi_2}{d\tau} &= \phi + \chi - \xi_2 - \rho_2 + \pi_x(\xi_1 - \xi_2) \\
\frac{d\eta_2}{d\tau} &= \alpha(\phi - \rho_2) + \pi_y(\eta_1 - \eta_2)
\end{aligned}
\tag{1.7}
$$

$$
\rho_{i'} = \gamma\phi \frac{\xi_{i'}\eta_{i'}}{1 + \xi_{i'} + \xi_{i'}^2 + \eta_{i'}} \quad (i' = 1,2) \tag{1.8}
$$

Der Einfachheit halber wird das Gleichungssystem - das Seeligsche Oszillator-System - häufig in der Form

$$
\begin{aligned}
\frac{d\underline{\xi}}{dt} &= f(\underline{\xi}, \underline{\mu}) \quad , \quad \underline{\mu} \in \mathbb{R}^7 \\
\underline{\xi} &= (\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2)^\top
\end{aligned}
\tag{1.9}
$$

geschrieben, d.h. als ein parameterabhängiges autonomes System.

Nach den bisherigen Ausführungen beschreibt das Gleichungssystem (1.7) bzw. (1.9) einen gepumpten Vorgang (siehe Kapitel 2 für Erläuterungen). Dieser soll, gemäß nachfolgenden Fragestellungen, zu einem gepumpten Reaktions-Diffusionsprozess erweitert werden; Ausgangspunkt dafür ist das Kipp-Verhalten der durch Permeation in Verbindung stehenden Reaktionen.

Das Kipp-Verhalten des Seeligschen Universaloszillators ist dem FLIP-FLOP der Computergedächtniselemente ähnlich. Daraus ergibt sich die naheliegende Frage, ob sich eine gewisse Kette dieses Reaktionsschemas als geeignet erweisen kann für (chemische) Informationsverarbeitung - Informationskodierung bzw. -Wiedergabe. Unter chemischer Informationsverarbeitung verstehen wir die Aufnahme, Bewahrung (Konservierung) und Wiedergabe von Informationen (in Impulsform) mittels Prozessen, die durch chemische Reaktionskinetik bestimmt werden. Der Ausgangsaufgabe dieser Arbeit ist daher

folgende Fragestellung:

FRAGE F1: WERDEN MEHRERE SEELISCHE UNIVERSALOSZILLATOREN MITTELS ZULASSUNG VON DIFFUSION ZU EINEM NETZGEBILDE ZUSAMMENGEFASST (D.H. ZU EINEM NETZWERK VON INTERAGIERENDEN KOMPARTMENTS) BEHÄLT DANN DAS RESULTIERENDE GEBILDE (ABB. 1.2 UNTEN) DIE FLIP-FLOP EIGENSCHAFT ? KANN ES DURCH KONDITIONIERUNG DIESE EIGENSCHAFT ERLANGEN, EIN FLIP-FLOP ZU SEIN ? EIGNET SICH EIN SOLCHES GEBILDE FÜR CHEMISCHE INFORMATIONSSPEICHERUNG, -VERARBEITUNG, BZW. -WIEDERGABE ?

Der Sachverhalt von Frage F1 ist in Abb. 1.2 verdeutlicht:

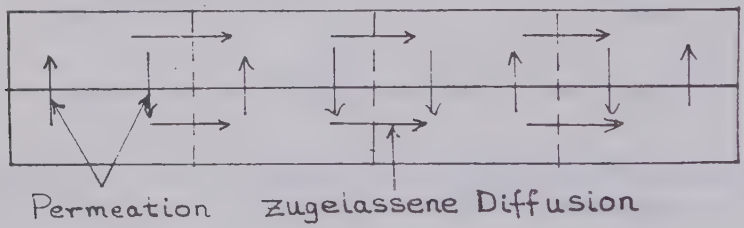


Abb. 1.2

Das hat zur Folge, daß es zwei Interaktionsprozesse gibt:

a) die Permeationen (Membrandurchflüsse), und
b) die Diffusion (räumliche (Um)Verteilung) längst der -Richtung in Abb. 1.2.

Die klassische Beschreibung dieses Sachverhalts ist gegeben durch das Reaktions-Diffusionssystem, das durch DGLen von folgendem Typ

$$\frac{\partial \underline{c}}{\partial t} = \underline{\underline{D}} \nabla^2 \underline{c} + f(\underline{c}, \underline{\mu}) \qquad (1.10)$$

$$\underline{\underline{D}} \triangleq \begin{pmatrix} d_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_4 \end{pmatrix}$$

beschrieben wird; die Komponente des Vektors $\underline{c}$ sind dann Funktionen von Raum und Zeit. Ohne das Diffusionsglied in (1.10) erhalten wir (1.9) - das Seeligsche Oszillator-System. Daher wird (1.10) in Bezug auf Abb. 1.1b und Abb. 1.2 als das 'Seeligsche Reaktions-Diffusionssystem' bezeichnet. Infolgedessen nimmt die Frage F1 folgende algemeine Form:

FRAGE F2: IST EIN SEELIGSCHES REAKTIONS-DIFFUSIONSSYSTEM EINEM SEELIGSCHEN OSZILLATOR-SYSTEM VERHALTENMÄSSIG ÄHNLICH ?

Ziel dieser Arbeit ist eine positive Beantwortung dieser Frage:

Angestrebt ist ein analytisches Modell, das numerischen Simulationsproblemen Rechnung trägt. In nachfolgenden, beginnend mit §1.2, werden die erforderlichen Voraussetzungen entwickelt.

Es gibt viele Untersuchungen bezüglich biologischer und chemischer gepumpten Vorgänge, am häufigsten auf der Grundlage der Nichtgliechgewichtsthermodynamik bzw. der Statistischen Mechanik, siehe de Groote + Mazur [A-14] und Nicholis + Prigogine [C-20]. Ihre gemeinsame, experimetell gesicherte Charakteristika sind:

1) Die Existenz von mehrfachen Niveaus, die als 'Steady States' - homogene bzw. fast homogene Zustände - bezeichnet werden,
2) Die Bewirkung von Niveauübergänge durch Pumpaktionen, und
3) Die Absorption oder Emission oder beides von Energie und/oder Materie als Bestandteil der durch Pumpaktionen bewirkten Niveauübergänge.

In physikalischen Systemen ist das Laserphänomen ein wohlbekanntes Beispiel, siehe Köpf [E-34] , Lengyel [E-37] , Nussenzweig [E-46] Steele [E-58] , Svelto [E-59] , Sze [E-60] , Yariv + Gordon [E-67] und Weber + Herziger [N-20].

In rein chemischen Systemen sind diese Übergänge die atomaren und molekularen Energietransformationen (quanten-chemische Probleme), begleitet in vielen Fällen von atomaren bzw. molekularen Strukturveränderungen. Der Zusammensetzung nach ist ein Ionensystem (siehe unten bezüglich der Präzisierung) das einfachste Beispiel eines chemisch pumpbaren Systems; diese Arbeit wird solchen Ionensystemen gewidmet, für die ein vielfach veränderliches Verhalten gewünscht wird. Ein solches Verhalten, das die Existenz mehrfacher, ineinander transformierbarer Niveaus eines Systems voraussetzt„ wird in der Literatur häufig ohne analytisch abgeleitet und begründet zu sein (siehe Borell [A-4] , Chalazonitis [A-7] , Cormier at al [A-10] , Hammes [A-25] , Hartman [A-27] , Kauzman [A-34] , Sommer [A-64] , Spinks + Woods [A-65] , Rice [B-31] , Delcroix [C-6] . Diese Lücke wird in der vorliegenden Arbeit als Teilantwort von Frage F1 geschlossen und führt hierdurch, mittels des Hilfsbeispiels der Nervenfaser, zu einem neuen Modellvorschlag bzgl. gepumpter Prozesse und deren Klassifizierung (mit Hilfe experimenteller Untermauerungen).

Zwecks präziser Unterscheidungen bzgl. der hier auftretenden modelltheoretischen Ansätze wollen wir Folgendes festhalten:

DEFINITION 1.2: *(Chemische Systeme): Unter einem chemischen System wird ein Vorgang/Prozess verstand, der folgende Bestandteile und Charakteristika aufweist:*

E1: Er besteht aus einer Kombination von Atomen, Molekülen, Elementarteilchen (Ionen, Elektronen usw), die chemische Spezies genannt werden.

E2: Es verändert seine Struktur durch Reaktionen, fortan als chemische Kinetik bezeichnet.

E3: Die Reaktionen sind erkennbar durch die folgenden Charakteristika:

a) Energieumwandlungen - Veränderungen des Wärmehaushalts, der eletrischen, magnetischen Strukturen und des Druckverhaltens

b) Bildung neuer Strukturen (Elemente usw).

E4 Die Reaktionen können durch Autokatalyse (Selbstzündung der Elemente) und/oder durch Beeinflussung von aussen mit Hilfe von Zugabe bzw. Abnahme von Energie und/oder Materie erfolgen.

Somit ist ein chemisches System durch eine Kinetik und die sie begleitenden Erscheinungen bestimmt. Die Energie, von der in der obigen Definition gesprochen wird, wird in Kapitel 2 näher präzisiert. Für physikalische Systeme gilt die Eingenschaft E1 oben (in Verbindung mit der Betrachtung von Bewegungen und der Energie der Bewegungen). Für biologische Systeme gilt neben den Eigenschaften eines chemischen Systems ein charakteristisches Kennzeichen, das als 'Leben' bezeichnet wird; dies wird nicht näher erläutert.

Ein chemisches System wird als 'diskrete System' bezeichnet, falls es ähnlich der Darstellung der klassichen Mechnik (Massenpunktbewegung) durch gewöhnlicher DGLen der Form (1.9) dargestellt wird und als 'verteiltes System' ('Distributed System'), wenn es in Raum und Zeit durch partielle DGLen dargestellt wird, siehe Gavalas [C-12], und Mbaeyi [B-19]. Diese Arbeit wird u.a. den modelltheoretischen Problemen von verteilten chemischen Systemen im Sinne der durch Abb. 1.2 dargestellten Fragestellung gewidmet, siehe §1.2 unten.

Angesichts der Rolle der Nervenfaser als Hilfsbeispiel bzgl. der Lösung von Frage F2, sind die Elemente des Reaktionsschemas in Abb. 1.1a bzw. Abb. 1.2 fortan Ionen, siehe Seelig [A-61]. Somit ist das hier zu betrachtende Seeligsche Reaktionssystem ein Ionensystem. (Ist die bestimmende Kinetik eines chemischen Systems die Folge von Autokatalyse, reden wir von autokatalytischen chemischen Systemen; wir reden von gepumpten chemischen Systemen, wenn dies die Folge von äusseren Einwirkungen ist, von komplexen chemischen

Systemen, wenn Kombinationen von beiden auftreten. Der Einfachheit halber beschränken wir uns in dieser Arbeit auf ein gepumptes chemisches System, das noch dazu ein verteiltes System ist, und spezifischer ein verteiltes Ionensystem).

Zwecks positiver Beantwortung von Frage F1 werden folgende Definitionen stets vorausgesetzt:

DEFINITION 1.3: *Unter GEDÄCHTNIS in einem chemischen System wird die Bewahrung von Information verstanden, die als Folge einer chemische Kinetik abgegeben wird.*

Eine ausführliche Behandlung von Gedächtniskonzepten übersteigt den Rahmen dieser Arbeit; für einen Versuch einer Präzisierung zwecks späterer eingehenden Klassifizierung wird auf Mbaeyi [A-43] verwiesen; dort wird Bezug genommen auf biologische Gedächtnisprobleme, insbesondere chemische Informationskodierung auf der Grundlage von molekularer Dynamik. In der obigen Definition 1.3 ist ausdrücklich auf die Charakterisierung von 'eingegebener Information' verzichtet worden, um damit autokatalytisch bewirkte Niveauübergänge einbeziehen zu können; mit anderen Wörten, die abgegebene Information braucht nicht notwendigerweise die Folge äusserer Anregungen (Einwirkungen) zu sein, wie z. B. in Fällen spontaner Wärmeemission (wie sie bei spontanem Zerfall einiger molekularer Aggregate stattfindet), oder auch spontane Lichtemission etwa bei resonanzartiger Selbstzündung atomarer bzw molekularer Komplexe.

Geschieht die Bewahrung von Information in einem gepumpten System, so ist die durch eine Kinetik bewirkte Informationsabgabe eine -Wiedergabe.

DEFINITION 1.4: *Unter 'INFORMATION' in einem chemischen System wird eine bestimmte Energiemenge verstanden, die als das Vielfache einer Einheit (fortan als 'Quanten' bezeichnet) darstellbar ist.*

In Hinblick auf den Vergleich mit dem Computergedächtnis muss zwischen Gedächtnis als solchem und dessen operativer Aktivierung unterschieden werden:

DEFINITION 1.5: *GEDÄCHTNISOPERATION ist die Menge von Aktionen - operative Verfahrensschritte -, die notwendig sind für die Erhaltung bzw. Abgabe von Information gemäß Definition 1.3.*

Somit ist die (0,1)-Bezeichnung der Computerterminologie zutre-

ffend für eine Pumpaktion, wobei 0 und 1 für die Niveaus des betrachteten gepumpten chemischen Systems benutzt werden. Durch die nachfolgenden analytischen Entwicklungen (Kapitel 3 und 4) wird ersichtlich, daß sich das (0,1) auf makroskopische Zustände mit vielen mikroskopischen Zwischenstadien bezieht - ein Ergebnis, daß durch viele experimentelle Resultate untermauert ist.
Die Notwendigkeit der 'Quantisierung' der Information nach Definition 1.4 erfordert modelltheoretische Ansätze, die einer Quantisierung des zu betrachtenden Prozesses gleichkommt. Anlehnend an die Methode und Grundgedanken der Finiten Elemente (in der klassischen Kontinuumsmechanik), wird dies in Form einer speziellen Modellform (hierarchische Modelle) eingeführt; (für die Zulässigkeit, atomare bzw. molekulare Komplexe als Kontinuum zu betrachten, verweisen wir auf Haken [A-23] Seite 63 - 78). Dadurch wird ein Modell erreicht, das sowohl die makroskopischen als auch die mikroskopischen Aspekte zusammenhängend darstellt; diesbezüglich erfolgen die erforderlichen Erläuterungen und Begründungen in Kapital 2, einschließlich der Vorzüge dieser Ansätze.

1.2 Ergebnisse:

1.2.1 KONSTRUKTION EINER EINHEITLICHEN MATHEMATISCHEN THEORIE CHEMISCHER LASER

Ein wichtiges Ergebnis bzgl. Fragen F1 und F2 ist die erfolgreiche analytische Konstruktion einer vereinheitlichten mathematischen Theorie chemischer Laser. Sie stützt sich auf andere Ergebnisse, die nicht in einzelnen hier in dieser Einführung genannt unf erläutert werden (siehe die Zusammenfassung, die jedem Teil dieser Arbeit vorangestellt wird). Die Leitgedanken zu diesem Ergebnis werden allerdings hier skizziert.

Motiviert durch mögliche Anwendungen, die in §3.1.3 kurz zur Sprache kommen werden, soll, im Vorgriff auf die nachfolgenden Erläuterungen, das Seeligsche Reaktions-Diffusionssystem, ein Ionnensysetm, als ein k-dimensionaler Leiter mit Gedächtnis ($1 \leq k \leq 3$) verstanden werden. Diesbezüglich bietet sich eine Nervenfaser bzw. ein Nervenbündel als natürliches Musterbeispiel k-dimensionaler Leiter an. Demnach ist Frage F2 folgendermasse bejaht: Die nach Abb. 1.2 gesuchte Kette Seeligscher Oszillatoren ist als NERU ('Neural Relay Unit', siehe Mbaeyi [A-41]) aufzufassen. Die Nervenfaser, ein natürlicher Prototyp eines Ladungstransportsystems, wird

verstanden als die Vereinigung von mehreren Ladungstransportbausteinen, in der jeder Ladungstransportbaustein (CTD - 'Charge Transfer Device') der Nervenfaser dem NERU gleichzusetzen ist, siehe Mbaeyi [A-41] für die Darstellung einer Nervenfaser, Länge L, mittels einer NEREMAX ('Neural Relay Matrix') und auch §2.3.2 unten. Da jede symmetrische Häfte von NERU funf Energieniveaus (also 4 Energieübergänge' besitzt, heisst dies: Die gesuchte Kette Seeligscher Oszillatoren entspricht der Existenz eines symmetrisch gepumpten Systems mit 5 Energieniveaus bzw. z Niveauübergänge.

ANMERKUNG 1.6: Der Herleitung von NERU bzw. NEREMAX liegt eine nichtlineare feldtheoretische Betrachtung zugrunde, deren Erläuterung sich ausd rücklich auf die Punkte beschränken wird, die hier unbedingt benötigt werden, sofern keine anderweitigen Literaturhinweise nachweisbar sind, siehe §2.2.

Dieses Ergebnis führt zu folgender theoretischer Feststellung: Es existiert ein Ionensystem, das so beschaffen ist, daß es einem CTD gleichkommt; seine Bestimmtheit durch die begleitende chemische Kinetik macht es zu einem chemischen Laser. Ein Laser produziert eine kohärente optische Strahlung, die durch Anregung erzeugt wird; er ist dadurch charakterisiert, daß die angesprochene Anregung (äussere Einwirkung, autokatalytische Selbstanregung) eine Populationsinversion der physikalischen bzw. chemischen Elemente in einem System bewirkt. Das Laserphänomen ist ein gepumpter Vorgang.
Der chemische Laser ist daher ein chemisches System, dessen Populationsiversion durch entsprechende chemische Kinetik bestimmt ist, begleitet durch einen beobachtbaren optischen Effekt (Fluoresenz, Luminisenz als Zeichen von optischen Strahlungen) oder durch verwandte Effekte (z.B Farbenveränderungen (Farbenlaser), Temperaturveränderungen). Die hier ausgeführten phänomenologischen Effekte - neben anderen Überlegungen - machen eine Reihe von Ergänzungen zum Seeligschen Modell und dessen Erweiterung zu einem Reaktions-Diffusionsschema erforderlich, siehe §2.3

Während die Betrachtung der Mechanik der Nervenfaser zum analytischen Modell von chemischen Lasern führt, ergibt sich aus der Betrachtung der Informationskapazität der Nervenfaser ein einheitliches Modell sowohl für CW ('Continuous Wave' - dauerstrich) als auch für pulsierte chemische Laser. In diesem Zusammenhang werden die Rollen und analytischen Strukturen von Relaxationszeiten und

Diffusionskoeffizienten in Evolutionsprozessen erörtert. Die Erlauterung dieser wichtigen Voraussetzungen bilden auch einen wichtigen Teil dieser Arbeit. (In einem gepumpten Vorgang ist ein CW Laser durch eine kontinuerliche Welle charakterisiert, während ein gepulster Laser sich durch eine Folge von Impulsen (kurzen Wellen) auszeichnet, wobei die Abstände zwichen zwei einander folgenden Impulsen massgeblich durch entsprechende Relaxationseingenschaften bestimmt sind).

1.2.2 NEURONIC-I: MODELL EINER KETTE SEELIGSCHER OSZILLATOREN ALS INFORMATIONSPROZESSOR

Wie kann eine kette Seeligscher Oszillatoren, die der Nervenfaser nachgebildet ist, als ein gedächtnisgeprägtes Informationselement dienen ? Durch die analytische Modellierung der Interaktion zwischen dem Axon und der Synapse hat sich ein langgehegter Zweifel bestätigt - nämlich die Frage, ob das Gedächtnisgeprägte Verhalten im Nervensystem dem Axon, der Synapse oder beiden zuzuschreiben ist, siehe Mbaeyi [A-42] und Noback + Demarest [A-48] . Demnach stellt sich die Frage, welche Konfiguration der gesuchten Seeligschen Kette die Informationsspeicherung ermöglicht, wenn man dabei nicht an Koppelung durch Elemente denkt, die der Synapse nachgebildet sind.

Die Lösung hierzu, in §2.5.3 eingehend erläutert, liegt in der Konstruktion eines integrierten Chips - eines (5 x 5) Arrays mit der funktionellen Struktur des Axons; als Resultat erhalten wir Abb. 1.3:

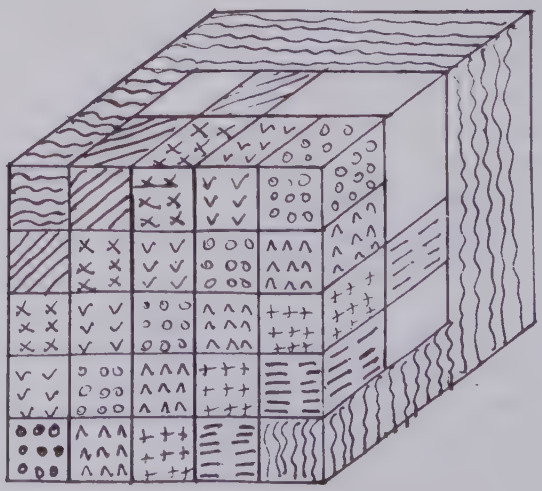


Abb. 1.3

Abb. 1.3 ist eine aufgeblähte Darstellung einer dunnen Rechtecks mit einer Oberfläche, die folgendermassen beschaffen ist: Mit der 1-dimensionalen Seeligschen Kette, als NERU verstanden (§1.2.1), wird die Figur Z gezogen, die wiederum mit gleichartigen Ringen von 1-dimensionalen Ketten einen gemeinsamen Schnittpunkt hat (siehe §2.5.3 für Einzelheiten der Konstruktion).

1.3 Aufbau der Arbeit und Methodische Ansätze:

1.3.1 AUFBAU: Die Arbeit gliedert sich in zwei Teile; jedem Teil wird eine Zusammenfassung vorangestellt, in der die wichtigsten Entwicklungen bzw. Resultate angekündigt sind. Daher beschränkt sich die Schilderung der Kapitel hier auf grobe Skizzen:
Im 1. Teil: Kapitel 2 ist der Entwicklung von erforderlichen neuen Konzepten gewidmet, während Kapitel 3 dazu dient, die Entwicklungen der vorausgegangenen Kapitel in Strukturen zu verwandeln, die zur positiven Beanwortung von Frage F1 verhelfen.
Im 2. Teil: In Kapitel 4 werden die gewonnenen Modellgleichungen einer kurzen qualitativen Analyse unterzogen, die der numerischen Betrachtung (Kapitel 5) dienlcih sind. Die numerischen Betrachtungen sind speziell zugeschnitten auf eventuelle Simulationsverfahren, die die Suche nach bestimmten Strukturen ermöglichen; hierzu werden die mathematischen Eigenschaften von speziellen Funktionen herangezogen. Für eventuelle Simulationsversuche sind die gewonnene Modelle als Steuerungsmodelle zusammengefasst, einschließlich des Flußdiagrams.

Die Arbeit hat am Ende von Teil 2 einen Anhang, in dem die benötigten mathematischen Grundbegriffe zusammengefasst sind.
Die Literaturangaben sind in verschiedene Teile untergeteilt, als Wiederspiegelung verschiedener Oberlegungen, die zusammengezogen in diese Arbeit einfließen. Die Teile werden mit A, B, usw. gekkenzeichnet; demnach sind die Literaturverweise in der Arbeit mit A- , B- usw. angegeben, wobei eine Nummer stets dem Bindestrich folgt. Diese Literaturverweise werden stets in eckige Klammer gesetzt, zur Unterscheidung von Querverweisen unter den Gleichungssystemen in der Arbeit; für das letztere werden die Verweise (1.--, 2.-- usw.) in runde Klammer benutzt, wo bei die Zahl 1, 2, usw. Hinweis auf eine betroffene Kapitel bedeutet und die Zahlen nach dem Punkt die Durchnumerierung der Gleichungen in jeder Kapitel bedeutet.

Eine Liste von Bezeichungen und Symbolen, sofern sie durchgehend benutzt werden, ist der Arbeit vorangestellt; die restlichen werden nach Bedarf eingeführt.

1.3.2 METHODISCHE ANSÄTZE: Dies ist eine systemstheoretische Untersuchung der Frage nach der Konditionierbarkeit chemischer Systeme. Angesichts der dabei auftretenden Komplexität wird durch die Betonung von strukturell-funktionellen Zusammenhängen eine vereinfachende Kanalisierung der Komplexität angestrebt.
Für den Anfang werden die einfachste Einblicke über deterministische Modelle erzielt. Trotz der Notwendigkeit des Konzepts eines 'stoschastischen Gedächtnisses' (Random Memory) im Zusammenhang mit der Definition von Konditionierbarkeit, werden keine stochastischen Betrachtungen angestellt. Zwar entspricht ein stochastisches Steuerungsmodell den eigentlichen Tatbeständen von Simulierungsversuchen, weil Rauschen und sonstigen Störungen in und um ein System zu berücksichtigen sind. Dies, allerdings, macht weitere Voraussetzungen notwendig, deren Entwicklung den jetzigen Rahmen sprengen würden. Zum Beispiel: Die bestimmenden Einflüsse von Diffusionskoeffizienten und Relaxationszeiten (in Reaktions-Diffusionssystemen) machen es notwendig, deren Rauschen zu berücksichtigen, was wiederum einen Anfang mit Gleichungen wie Fokker-Planck-Diffusionsgleichung (siehe de Groote + Mazur [A-14]) notwendig machen konnte, oder als Alternative dazu das Heranziehen von Renormalisierung von Transportkoeffizienten, siehe Mazur [D-45] Eine deterministische Annäherung als Anfangsbasis hat den Vorzug, daß sie eine einfachere Erfassung der Rolle dieser wichtigen Parameter ermöglicht, und dadurch den Weg ebnet, in zukünftigen Untersuchungen das Rauschverhalten eines Reaktions-Diffusionssystems in engerer Beziehung zum Rauschverhalten dieser Parameter zu sehen.

Zum Schluß soll noch angemerkt werden: Mit stochastischen Überlegungen anfangen heisst, sich ausschließlich auf einen 'Steady State' zu konzentrieren, wobei ergodisches Verhalten (bei zulässigen Störungsgrössen) erwartet werden kann. Für Übergänge zwischen 'Steady States' bzw. für Zusände weit weg von stationären Zuständen erweist sich die ergodische Überlegung als nicht zutreffend; für eine knappe, aber eingehende Übersicht über dieses Problem verweisen wir auf Rice [B-31] und andere verwandte Beiträge in Zewail [E-69].

I. TEIL

MODELLTHEORETISCHE VORAUSSETZUNGEN

FÜR

CHEMISCHE ENTWICKLUNGSSYSTEME

(Grundlage für Gedächtnisvorgänge)

ZUSAMMENFASSUNG VON TEIL 1

DAS HAUPTERGEBNIS IN DIESEM TEIL DER ARBEIT IST DIE KONSTRUKTION VON NEURONICS-I (SIEHE §1.2.2 UND §§2.5.3 BIS 2.5.5); ES STÜTZT SICH AUF VIELSEITIGE GRUNDLAGEN, DIE ZUM TEIL SELBSTÄNDIGE TEILERGEBNISSE DARSTELLEN:

1. ALS ERSTES ZEIGEN WIR, WIE SICH DIE MODELLIERUNG KOOPERATIVER PROZESSE IN DER FORM DARSTELLEN LÄSST, DIE FÜR ALGORITHME DER PARALLEL-VERARBEITUNG GEEIGNET IST; DIE EINFLÜSSE AUS DER COMPUTERWISSENSCHAFT, DIE DABEI EINE ROLLE SPIELEN, WERDEN EBENFALLS ERLÄUTERT. DIE ANWENDUNG DIESER METHODE AUF QUANTITATIVE MODELLIERUNG ELEMENTARER CHEMISCHER PROZESSE WIRD DANN GEZEIGT.

2. DIE GRUNDRISSE EINER NICHTLINEAREN FELDTHEORIE, DIE DER SEELIGSCHEN AUFGABE GERECHT WIRD, WIRD GROB SKIZZIERT; SIE ERLAUBT EINE ALLGEMEINE DEFINITION FÜR DAS KONZEPT VON STEADY STATES UND DEREN KLASSIFIZIERUNG. WESENTLICHE STÜTZPFEILE DABEI SIND VERALLGEMEINERTE DIFFUSIONS- UND RELAXATIONSKOEFFIZIENTEN, DIE DICHTEABHÄNGIG, UND SOMIT ORTSABHÄNGIG, SIND. DIE ÜBERLEGUNGEN FÜHREN ZU DEM ERGEBNIS, DAß FLIP-FLOP EIN GRUNDPRINZIP DER EVOLUTION IST. DIE IN DIESER ARBEIT EINGEFÜHRTEN GRUNDLEGENDEN IDEEN WERDEN AN BEISPIELEN DER 'OREGONATOR' UND GIERER-MEINHARDT MODELLE ILLUSTRIERT. AUS DIESEN ÜBERLEGUNGEN RESULTIEREN NICHTLINEARE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN; DURCH VERGLEICHE MIT DEM SEELIGSCHEN REAKTIONS-DIFFUSIONSSYSTEM (SIEHE SYSTEM (1.10) AUF SEITE 8) WIRD DANN GEZEIGT, DAß DIE PARAMETER DES SEELIGSCHEN MODELLS DYNAMISCH UND RAUMABHÄNGIG DEFINIERT SIND.

3. NACH KNAPPER ERLÄUTERUNG DER GRUNDLAGE DES LASERPHÄNOMENS UND DER HERLEITUNG VON ANALOGIEN ZU NERVENVERHALTEN, WIRD KONSTRUKTIV GEZEIGT, DAß DIE VORAUSGEGANGENEN ÜBERLEGUNGEN, DIE IN DIESER ARBEIT EINGEFÜHRT WURDEN, FOLGENDE ANTWORT AUF DIE IN DIESER ARBEIT DEFINIERTE SEELIGSCHE AUFGABE LIEFERN:
   EIN CHEMISCHES SYSTEM WIE DAS SEELIGSCHE, DAS SICH FÜR CHEMISCHE INFORMATIONSVERARBEITUNG EIGNET (SIEHE FRAGE F1), HAT DIE DURCH NEURONICS-I (ABB. 2.70 BIS

2.74) GEGEBENE KONFIGURATION, DIE DEM NERVEN-VERHALTEN NACHGEAHMT IST.

4. ALS LETZTES WIRD GEZEIGT, DAß DIE STRUKTUREN, DIE DER SEELIGSCHEN AUFGABE GERECHT WERDEN, GEWISSEN PERIODISCHE KONFIGURATIONEN AUFWEISEN. DADURCH GEWINNEN GEWISSE RANDWERTAUFGABEN DER RESULTIERENDEN SYSTEME VON NICHTLINEAREN DIFFERENTIALGLEICHUNGEN BESONDERE BEDEUTUNG. FERNER WIRD AUCH GEZEIGT, DAß DIE ENTSTEHENDE MATHEMATISCHE AUFGABE ZÜGE VON STEUERUNGSPROBLEMEN TRAGEN.

5. DAS NETZ VON SEELIGSCHER KINETIK (ABB. 1.1), DAS NEURONICS-I TRÄGT, IST IN ABB. 2.70 ZU SEHEN; DIE TEILUNG IN REINE REAKTION UND REINE DIFFUSION IST IN §2.5.4 ERLÄUTERT.

KAPITEL 2

Allgemeine Vorbereitungen

2.1: Modelltheoretische Probleme kooperativer Phänomene:

Für die positive Beantwortung von Frage F1 und F2 gemäß §1.2 sind eine Reihe von konzeptionellen Entwicklungen notwendig, um einen zusammenfassenden analytischen Rahmen für die Probleme zu schaffen. Diese Voraussetzungen werden in diesem Kapitel über den Weg einer direkten nichtlinearen Formulierung von Problemen geschaffen. Ausgangspunkt ist die Einbettung des Problemkomplexes in einen Rahmen, der die gewünschten konzeptionellen Entwickulungen begünstigt.

2.1.1: CHARAKTERISTIKA KOOPERATIVER PHÄNOMENE:

Kooperatives Phänomen ist die Bezeichnung für einen Vorgang, einen Prozess, in dem mehrere verschiedene und/oder gleichartige Elemente einheitlich zusammenwirken; diese Zusammenwirkung - das eigentliche kollektive Phänomen - erfolgt als eine funktionelle Ergänzung (gegenseitige funktionelle Unterstützung) unter den Elemeneten.
Elemente in diesem Sinne können

a) Elementare bzw. fundamentale Einheiten im Sinne der Chemie und Physik, und/oder
b) deren Zusammensetzungen zu wohl definierten Ensembles (Mengen), zum Beispiel Pseudoteilchen,

sein.

In systemstheoretischen Betrachtungen werden Elemente auch Komponente genannt, wie fortan hier. Die Zusammensetzung von mehreren Komponenten zu einer Einheit ergibt ein MULTIKOMPONENTENSYSTEM. 'Kooperarives Verhalten' bezeichnet daher das wahrnehmbare Verhalten eines Multikomponentensystems; seine besondere Charakteristika sind:

a) Einschränkung der Freiheitsgrade (Erläuterung unten) und der Anzahl der beobachtbaren Zustände der einzelnen Komponenten.
b) Jedes Verhalten, das dem Multikomponentensystem zugeprdnet wird, ist geordnet und wird einheitlich und synchron von allen Komponenten getragen, wobei das Verhalten nicht notwendigerweise als ein stochastisches Mittel des Verhalten der einzelner Komponenten abgeleitet werden kann; hierzu, Haken [A-20], Seite 9:

> 'In many disciplines of science we deal with systems composed of many subsystems..... Very often the properties of the large system cannot be explained by a mere random superposition of actions of the subsystems. Quite on the contrary the subsystems behave in a well organized manner, so that the total system is in an ordered state or shows actions which one might

even call purposeful.'

In ähnlicher Weise äussert sich Resch und Gutmannn [B-30]:

> 'Differences in building units are evaluated according to their temporal local significance and to their significance for the whole system. The building units of a real solid are found to serve on different levels within a ''hierarchic'' order. ..... In particular, it is not possible to recognize the individual behaviour of the parts from the statistical point of view. We shall therefore take another point of view from which the usual abstract description by means of atoms may be considered with regard to the complex and ordered relationships within the object under consideration. As atoms have no definable boundaries, they are subject to characteristic mutual ''penetrations'', which will differ from building unit to building unit. This means that it is extremely unlikely that one will find at any time building units within a system in precisely the same energy state. ..... '

Für wietere eigehende Diskussionen verweisen wir auf Haken [A-21] und [A-22], und Fröhlich [C-10].

ANMERKUNG 2.1: Mit Freiheitsgrad bezeichnet man die Anzahl von Variablen, die nötig sind, um die Ganzheit aller beobachtbaren Zustände einer Komponente eines Prozesses zu ermitteln, wobei die beobachtbaren Zustände sich auf meßbare phänomenologische Effekte beziehen. In der klassischen Mechanik (siehe Haken [A-23], Hameka [A-24], Kauzman [A-34], Schiff [A-59]) ist Bewegung der meßbare phänomenologische Effekt und die beobachtbaren Zustände sind die zeitabhängigen Ortsangaben von Elementen (im Euklidischen Raum).

Die Zusammensetzung von mehreren Seeligschen Oszillatoren zu einem Netzgebilde, wie in Abb. 1.2 (Kapitel 1), ergibt ein Multikomponentensystem (siehe §§2.3 und 2.5 für entsprechende Darstellungen); die Ermittlung von dessen Verhalten ist daher ein Problem von kooperativen Phänomenen.

2.1.2: UMRISSE DER DARSTELLUNGSPROBLEME KOOPERATIVER PHÄNOMENE:
Zwecks interpretierbarer numerischer Experimente, sprich Simulation, ist es erfoderlich, die Struktur der Probleme, die durch kooperative Verhalten aufgeworfen werden, zu verstehen und zu ordnen. Hierzu ist es besonders die Art der Verbindungen (d.h. Verknüpfungen) der Komponenten eines Multikomponentensystems, die einer Enträtselung bedarf. Das heisst, es ist erforderlich und hilfreich, die netzartige Struktur eines Multikomponentensystems zu ergründen und zu verstehen (wobei die für die Analytik und Numerik nützliche und interessante Netzstruktur nicht notwendigerweise der physikalisch und optisch wahrnehmbaren Beschaffenheit entsprechen muss); diesbezüglich bemerkt Wyatt [N-23]:

'The Techniques of network thermodynamics and bond graphs are gaining recognition as useful tools in computer modelling of biophysical systems. But there is a lesss celebrated aspect which is perhaps even more important - their ability to help us form a conceptual image of the way the parts of a complex system interact prior to any attempt at a numerical solution. Without some such Gesatlt our relation to the computer becomes a passive one, for we are unable to critically judge what it is telling us or to use its responses to pose a second round of more pertinent questions. As Rutherford Aris once commented:
''Modern day computers have an unrivalled capacity for producing reams of waste paper when presented with problems whosestructure is not first well understood.'

Die oben erläuterte Notwendigkeit ergibt sich auch aus folgenden komplimentären Fragen:

FRAGE F3: SIND DIE WAHRNEHMBAREN (D.H. MESSBAREN) VERHALTENSWEISEN EINES MULTIKOMPONENTENSYSTEMS BEKANNT, WAS LÄSST SICH ÜBER DAS VERHALTEN DER KOMPONENTEN SCHLIESSEN ?

FRAGE F4: IST DIE VIELFALT DER VERHALTENSWEISEN DER KOMPONENTEN BEKANNT, LÄSST SICH DANN DARAUS DAS WAHRNEHMBARE VERHALTEN EINES MULTIKOMPONENTENSYSTEMS ERMITTELN ?

Die Frage F4 entspricht der Problemstellung, die in Kapitel 1 eingeführt wurde, wobei allerdings das Problem eine kleine Vereinfachung durch die Forderung erfährt, daß das Verhalten des Multikomponentensystems (das Netzgebilde in Abb. 1.2) mit dem der Komponenten identisch sein soll - d.h. Frage 2, wonach Komponente und das Netzgebilde die Eigenschaft des Flip-Flops aufweisen sollen.

Mit anderen Wörten: Gesucht ist eine Darstellung, die Rückschlüsse vom Teil zum Ganzen und umgekehrt zulässt - eine Art Darstellung von Problemen im Sinne abgesclosser Algebren. Dies ist erreicht durch hierarchische Modelle; hierarchische Modellierung ist die Bezeichnung für die Darstellung von kooperativen Vorgängen als die ergänzende Zusammenwirkung mehrerer Ebenen unter Einfluß der Zusammenwirkung auf jeder Ebene (lokale Einflüsse). Schematisch dargestellt sieht dies so aus, Abb. 2.1. auf Seite 23:

Gegeben seien $\mathcal{E}_{11}, \dots, \mathcal{E}_{bc}$, $b \geq 2$, $c \geq 2$. Was sind die Beziehungen unter den $\mathcal{E}_{rs}$, $r = 1, \dots, b$, $s = 1, \dots, c$ derart, daß $\mathcal{E}_1, \dots \mathcal{E}_a$ ermittelt werden kann ? (Dies ist die im Kapitel 1 gestellte Seeligsche Aufgabe mit der einen Einschräknung, daß $\mathcal{E}_{rs}$ für jedes b und alle c, $\mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_a$ verhaltensmässig equivalent sein soll.
Die umgekehrte Frage ist: Gegeben seien $\mathcal{E}_1, \dots, \mathcal{E}_a$; was kann über $\mathcal{E}_{11}, \dots, \mathcal{E}_{bc}$ und die Beziehungen unter ihnen gesagt werden ?

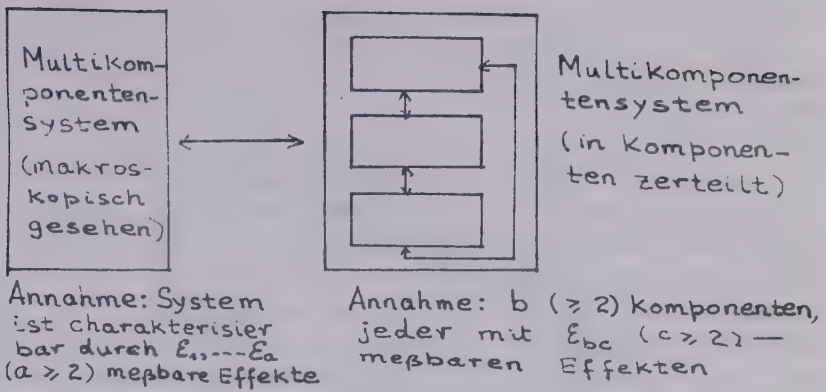


Abb. 2.1

Die hier angewandten Lösungswege werden in §2.2 eingeführt und in darauffolgenden Absätzen und Kapiteln weiter ausgebaut. Besondere Aufmerksamkeit gilt den nichtlinearen Effekten, die kooperative Prozesse auszeichnen; für eine knappe Zusammenfassung wird auf Kapitel 1 von Mbaeyi [B-19] verwiesen.

2.1.3: BEMERKUNGEN ZU DATENBASEN FÜR MODELLKONSTRUKTIONEN KOOPERATIVER PHÄNOMENE

Nicht nur die Simulierbarkeit eines Prozesses ist von Modellkonstruktionen abhängig, die leitende Einblicke in die mögliche Gestalt der Prozessvorgänge verschaffen sollen. Sondern es müssen daraus auch Rückschlüsse auf Verhaltensvariationen gezogen werden können. Ein wesentliches Problem betrifft die Datenbasen, die hierzu herangezogen werden.

Unter Datenbasen verstehen wir (quantifizierbare) Angaben/Werte, wodurch ein Prozess, dessen Unterteilungen und Verhalten, charakterisiert werden kann. Die Daten bestehen aus:

a) Funktionen und Parameter (von Raum, Zeit oder Raum-Zeit), die dazu deklariert sind, einen Prozess, dessen Teile und die Effekte, wodurch ihre Verhaltensweise erkennbar werden, zu spezifizieren, und manchmal

b) numerische Werte der obigen Funktionen und Parameter, die als Meßergebnisse empirischer Versuche am Prozess oder als Simulationsergebnisse ermittelt werden, wobei das letztere doch gewisse Kenntnisse über die mögliche Beschaffenheit eines Prozesses voraussetzt.

Auf der ersten Blick (eine Art 'optische Erwartung') liegt es näher zu vermuten, daß sich die zu erwartenden Rückschlüsse auf Prozessverhalten verbessern je größer die Datenmenge (d.h. je gößer die mikroskopischen Daten) sind. Abseits der Tatsache, daß es häufig nicht möglich ist, exakte mikroskopische Daten zu ermitteln, ist diese 'optische Erwartung' nicht notwendigerweise richtig, siehe Johnson [B-15] und [B-16] , Stanley und Mah [B-36] . Johnson, siehe [B-15], hat sogar bewiesen, daß unter Umständen eine zu größe Datenmenge zu einem Modell von instabilen Prozessen führt. Stanley und Mah ([B-36]) haben sich eingehend mit dem Problem von 'überschüssigen Datenmengen' ('Redundancy', 'Overmodelling' nach Johnson) beschäftigt in Bezug auf die Zerstückelung von Modellierungsproblemene, die im Zusammenhang mit chemischen Systemen auftreten. Diesbezüglich wird auch auf Mbaeyi [B-22] verwiesen, wo eine eingehende analytische Zusammenfassung dieser Problematik bezüglich dynamischer Vorhersage von Prozessverhalten geboten wird. Für allgemeinere Diskussionen über Modellierungsprobleme imselben Zusammenhang wird ferner auf Coffman [B-6] , Guttag [B-12] , Himmelblau [B-13] und [B-14] , Kevorkian et al [B-18] , Mbaeyi [B-21] und [B-24] , Zienkiewicz [B-44] .

Angesichts der Komplexität, die die analytische und simulationsorientierte Untersuchung kooperativer Phänomene aufweist, trägt der hier eingeschlagene Weg den Ergebnissen von Johnson u.s.w Rechnung; er erweist sich in wesentlichen Ansätzen deckungsgleich mit Emery, siehe [A-15] , der In Bezug auf Probleme von 1-dimensionalen Leitern notierte:

> 'The properties of organic metals and other highly conducting solids are far too complex to be understood by means of purely microscopic caculations.....
> 'Faced with this situation, it is fortunate that the restriction to one-dimensional motion brings alsong a compensating possibility of finding exact solutions of certain many-body problems. ....., but they do frequently contain so much of the essence that the solutions are able to offer some guidance about what is going on as well as to show where more approximate theories are to be trusted. Often no more is needed, for truly microscopic calculations rarely confront experiments: it is much more usual to get a feeling for what qualitative features can appear, to make limited predictions about the dependence of physical properties on temperature, frequency, etc, then to introduce phenomenological parameters which are fitted to experiment.....'

Der Einstieg in die vorliegenden Rahmenüberlegungen geht von einer

Erweiterung des klassich-gewordenen Modellierungsverständnisses aus. Gewöhnlich wird zwischen zwei Modellierungsmethoden unterschieden: Prozesssynthese (basiert vorwiegend auf empirischen Meßwerte bzw. Simulationsangaben und deren statistische Auswertungen), und Prozessanalyse, wie in Abb. 2.2 erläutert

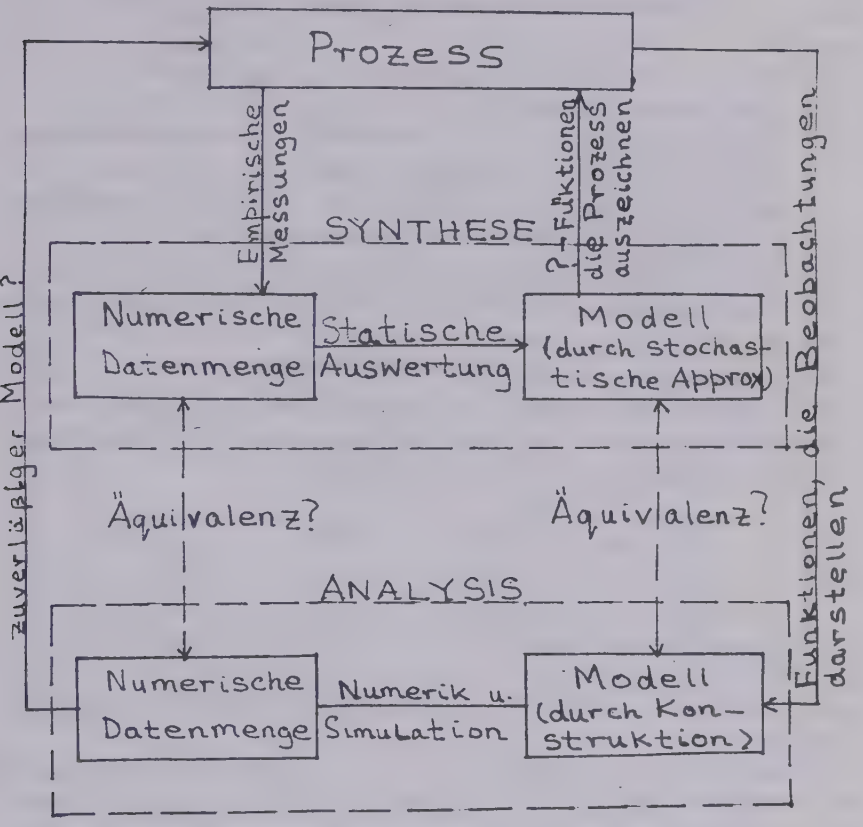


Abb. 2.2

Ein mittlerer Weg setzt etwas von beiden Methoden voraus, siehe Mbaeyi, [B-19] , für eine eingehende Erläuterung. Spezifisch für diese Arbeit liefern From [C-11] , Hoffmann [C-15] , Seelig [A-61] und [A-62] die simulations-determinierte Werte; für die andere Häfte siehe §2.2 unten, und auch ferner Mbaeyi [B-19] . Dieser mittlere Weg wird angereichert durch die Gedanken von endlich-dimensionalen Unterteilungen von Prozessen (Finiten-Elementen), siehe Oden [G-22] , Wilson et al [B-43] , Zienkiewicz [B-44] Allerdings werden diese Gedanken der Finiten-Elemente, aus der

klassischen Elastizitätslehre stammend und daher nicht ohne weiteres auf Raum-Zeit Probleme anwendbar, konsequent über sogenannte hierarchische Modelle für räumlich-zeitliche Probleme formuliert, siehe Mbaeyi [C-19] und [B-23].

Dieser angereicherte mittlere Weg wird durch folgende Schritte abgeteckt:

A Die Daten für den Prozess, siehe Abb. 2.2 oben, werden in zwei Untermengen zerlegt:
   1) Phänomenologische Daten - Funktionen, die die Effekte kennzeichnen, wodurch der Prozess beobachtbar ist, und
   2) Materie-Daten - Funktionen, die die Komponenten bezeichnen, aus denen sich der Prozess zusammensetzt.

B Partielle Information, empirisch oder durch Simulation gewonnen, muss über Teile von mindestens einer der beiden Untermengen der Datenmenge vorhanden sein.

C Der Teilraum, in dem der Prozess enthalten ist, wird mit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (siehe Bezeichnungen und Symbole, Seite 1-4) bezeichnet. Diesem Teilraum wird der Rand $\partial\Omega$ zugeordnet. Der Vereinigungsmenge $\Omega \cup \partial\Omega$ werden folgende Zerlegungen

(2.1)
$$\Omega \subseteq \bigcup_{i=1}^{m} \Omega_i \,, \quad \partial\Omega \subseteq \bigcup_{i=1}^{m} \partial\Omega_i$$
$$\Omega_i \subseteq \bigcup_{j=1}^{n_i} \Omega_{ij} \qquad \partial\Omega_i \subseteq \bigcup_{j=1}^{n_i} \partial\Omega_{ij}$$

zugeordnet. Demnach erweitert sich Abb.2.2 zu Abb. 2.3 auf Seite 27 dieser Arbeit.

Mit anderen Wörten: Im Gegensatz zu Abb. 2.2, ist ein einheitliches Modell gesucht, das zwar über den Weg der Analyse gewonnen wird, das aber derart beschaffen ist, daß es Teile der Datenmenge, die durch Synthese gewonnen wurde, reproduzieren kann. Diese Forderung wird in Abb. 2.3 durch den nichtleeren Durchschnitt der Datenmenge aus Abb. 2.2 symboliziert. Ferner muss das Modell mindestens eine elementare Überlegung der statistische Auswertung enthalten.

Im Sinne des Seeligschen Reaktions-Diffusions-Systems haben wir:

i) Die nach B) oben geforderte partielle Information ist gegeben durch die Konzentrationsangabne im Seeligschen Modell, siehe §1.1; es sind die Konzentrationen, die in Ω_{ij} in der in (2.1)

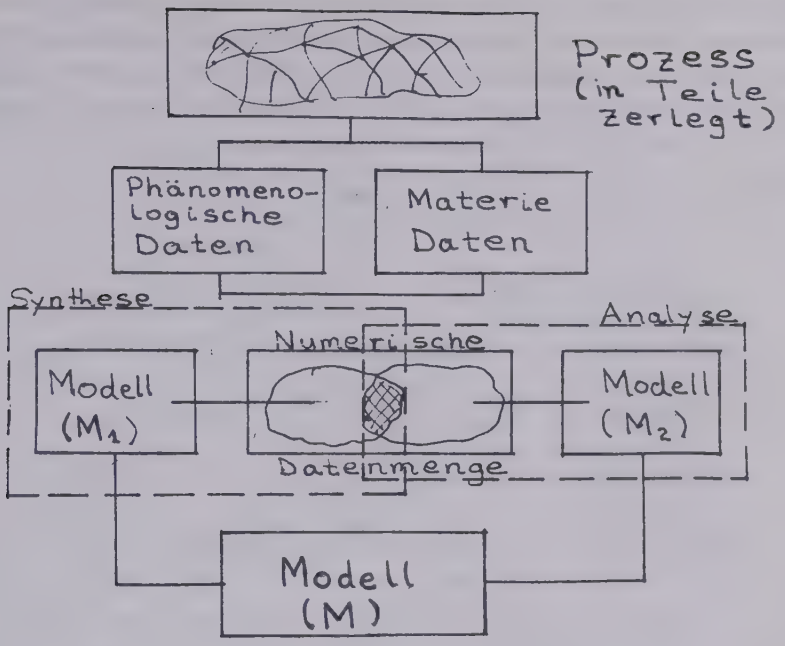


Abb. 2.3

angegebenen Zerlegungen enthalten sind (ein Grund für Frage F4), siehe §2.3.3 unten.

ii) Für einen 1-dimensionalen Leiter (mögliche Anwendung für das Seeligsche Reaktions-Diffusions-System) ist $\Omega \subset \mathbb{R}$ ein Intervall $(0, l)$, Abb 2.4a:

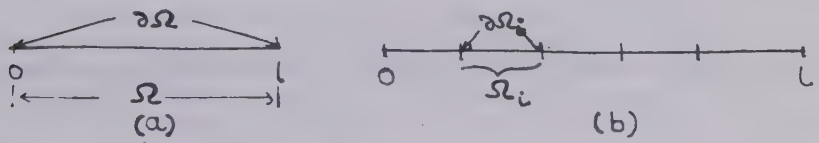


Abb. 2.4

Die Zerlegung $\bar{\Omega} \subset \cup(\Omega_i \cup \partial\Omega_i)$ ist in Abb. 2.4b dargestellt, und die Zerlegung $\bar{\Omega}_i \subset \cup(\Omega_{ij} \cup \partial\Omega_{ij})$ ist Abb. 2.5.

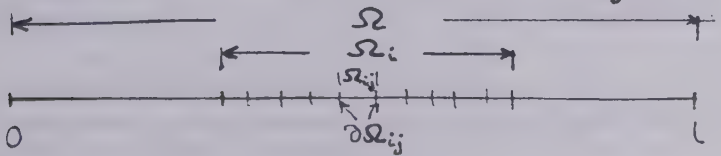


Abb. 2.5

Offenbar entspricht dieser Zerlegung eine Diskretisierung - ein für die Numerik von Gleichungen häufig angewandtes Verfahren. Allerdings endet der Vergelcih hier, was auch in §§2.2 und 2.3 unten begründet wird. Diese Unterscheidung wird aber hier veranschaulicht. Benutzt man den in Abb. 1.1b abgebildeten Kasten, so ergeben sich aus Abb. 2.4 und Abb. 2.5 Abb. 2.6 a) bis c) unten:

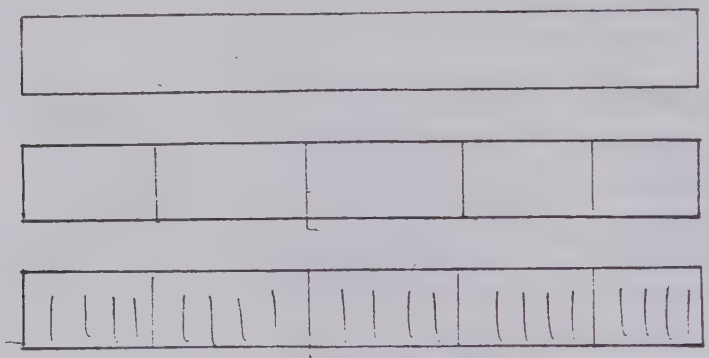


Abb. 2.6

Abb. 2.6a entspricht der gesuchten Kette (als ganzes betrachtet), die in der Zusammensetzung nach Abb. 2.6b die Frage F2 positiv beantwortet, unter Voraussetzung der detailierten Vorgänge, die durch Abb. 2.6c dargestellt werden. Diese Annäherung der kooperativen Vorgänge auf verschiedenen Ebenen lässt sich anschaulich so darstellen, wie in Abb. 2.7:

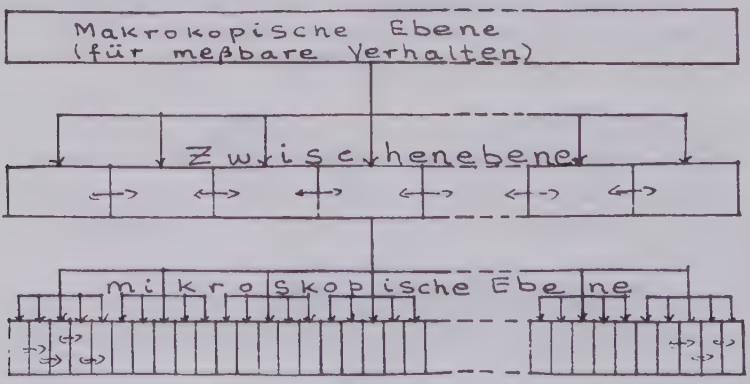


Abb. 2.7

In der vom Verfasser eingeleiteten Erweiterung der Prinzipien des hierarchischen Modells werden die Zusammenhänge zwischen den Ebenen in Abb. 2.7 mittels nichtlinearen Interaktionsfunktionen gesucht,

so daß mathematische läsbare geschlossene Darstellungen entstehen. Diese Art der Modellierung verhilft zu geschlossenen Simulationsprogrammen im Sinne von Parallel-Verarbeitung.
Das hierarchische Modell für Abb. 1.1b lautet Abb. 2.8:

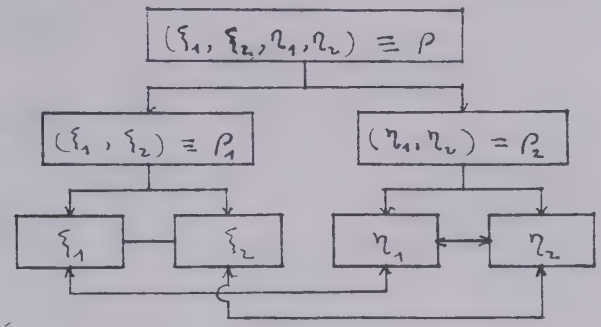


Abb. 2.8

Das hierarchische Modell für Abb. 1.2 unter Heranziehung von Abb. 2.6 a) und b) lautet Abb. 2.9:

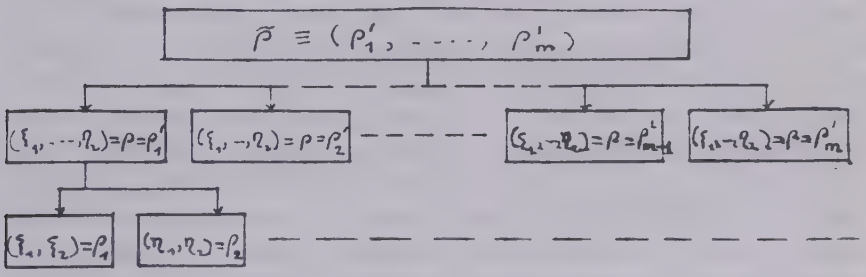


Abb. 2.9

Dadurch werden die Abb. 2.1 und Abb. 2.7 erweitert zu Abb. 2.10 (auf Seite 30).

ANMERKUNG 2.2: An und für sich ist der Gedanke von hierarchisch geordneten systemstheoretischen Untersuchungen nicht neu. Die Suche nach interpretierbaren Input-Output-Daten für die 'weichen' Wissenschaften (sozio-ökonometrische, soziologische, ökologische Probleme, Entscheidungsabläufe, industrielle Prozessverfahren usw) veranlasste ihre Entstehung. Neu allerdings sind

a) die oben erwähnte Einführung von nichtlinearen Interaktionsfunktionen zwischen den Ebenen eines hierarchischen Modells, und
b) ihre eindeutige Einordnung im Rahmen der endlich-dimensionalen Versuche (Diskretisierung, Finite-Elemente).

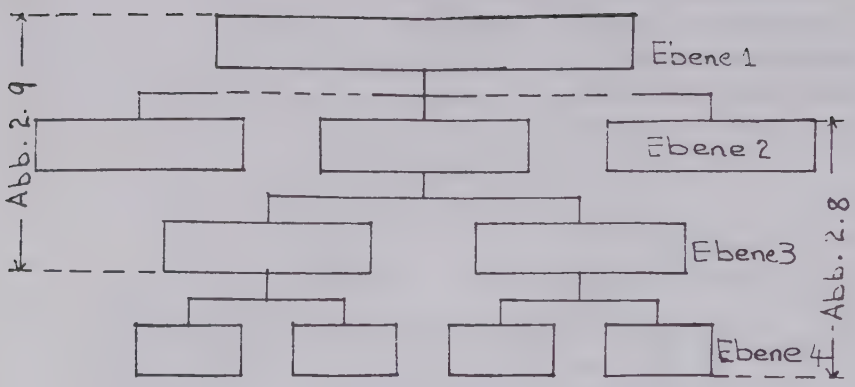


Abb. 2.10

In den obigen Ausführungen über die Zerlegungen $\bar{\Omega} \subseteq \cup(\Omega_i \cup \partial\Omega_i) \subseteq \cup(\Omega_{ij} \cup \partial\Omega_{ij})$ wurde bis jetzt kein Wort über die Indizes i und j verloren. Für die Seeligschen Aufgaben, Kapitel 1, liefert der Aufbau der gewünschten Kette, der Nervenfaser nach: $i = j = 2$ (Abb. 2.8), und $i = 9$, $j = 2$ für Abb. 2.9, (siehe unten für weitere Erläuterungen bzgl der Aufgabe dieser Arbeit). In einer allgemeinen nichtlinearen Feldtheorie der Evolution (in Vorbereitung) lässtc sich die Zahl m (Aggregations-Zahl genannt) genau durch Gleichungen beschreiben. Da aber $m \in \mathbb{N}$ sein muß, was möglicherweise durch Lösung der entsprechenden Gleichungen nicht immer erfüllt wird, öffnet diese Zerlegung einen Weg zur Efassung des natürlichen Rauschens (Fluktuationen, innere Anregungen usw genannt) in Evolutionsvorgängen. Eine fundierte analytisch-numerische Diskussion dieser Problematik zerprengt den Rahmen dieser Arbeit, siehe §1.3 oben.

Dieser Absatz wird mit zwei verwandten Bemerkungen beendet; beide sind simulationsorientiert. Parallel-Verarbeitungstechniken bieten einen Ausweg im Bezug auf die Berechnungskomplexität, die mit der quantitativen Analyse von kooperativen Phänomenen eng verbunden ist; hierzu Cobelli [B-5], Enslow [B-7], Grateloup [B-11], Karp [B-17], Thurber [B-38], Varmuza [B-39], Veress [B-40] Hierarchische Modellierung, wie sie in Abb. 2.10 zum Ausdruck kommt, liefert zugleich die Möglichkeit der Parallel-Verarbeitung mit Hilfe von (m + 1) Parallelprogrammen, wie in Abb. 2.11

dargestellt ist:

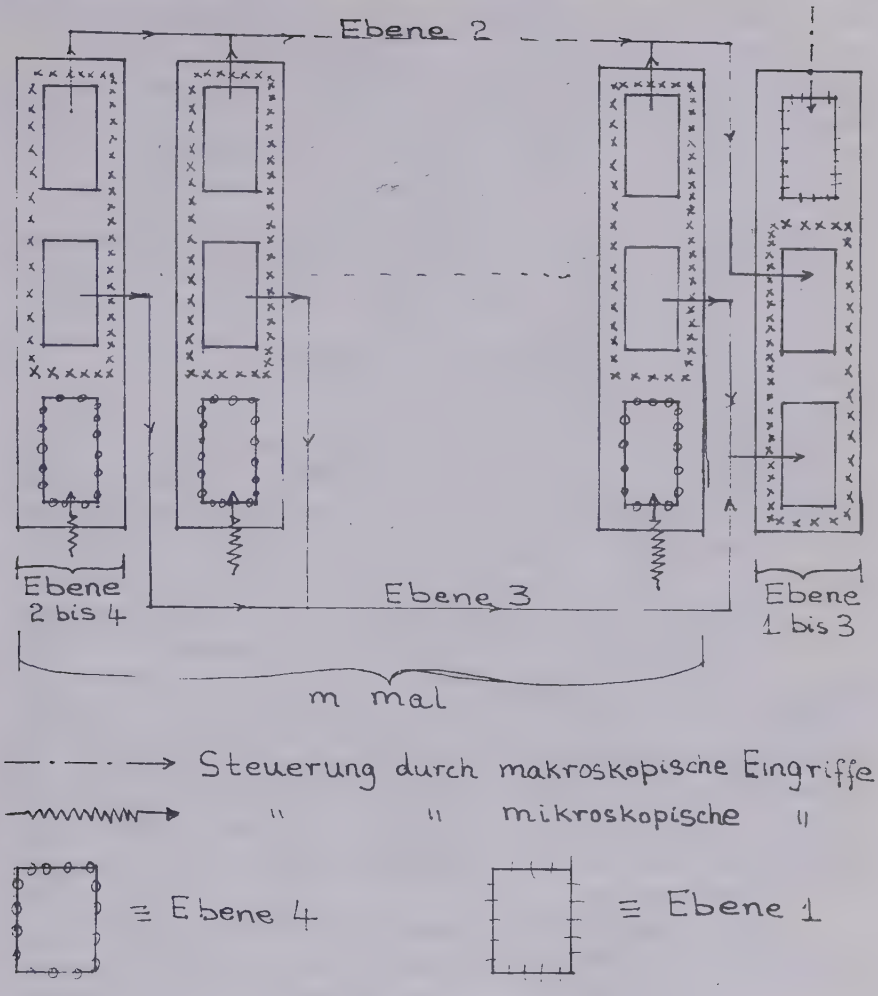


Abb. 2.11

Es lässt sich leicht nachprüfen, daß dies eine geschlossene Darstellungsmöglichkeit bietet; alle Elemente, die in Abb. 2.10 enthalten sind, sind auch in Abb. 2.11 vorhanden. In dieser geschlossenen 'autonomen' Darstellung erzeugen sich die Elementen zwar gegenseitig, trotzdem erlaubt die Darstellung Zugriffe zu gewünschten Daten zu beliebigen Positionen (in Raum-Zeit).

Die Anstöße, die die Computerwissenschaft für die Entwicklung von

hierarchischen Modellierungen natürlicher Prozesse lieferte, sollen nun eindeutig, aber knapp verdeutlicht werden. Dabei gehen wir von einem allgemeinen Verständnis von 'Computation'/'Computability' (Berechenbarkeit) aus, siehe Wegner [B-41], die jedes Modell zu einer Art abstrakter Rechenanlage deklariert.
Zur präzisen Definition und Klassifizierung von Rechenanlagen bedient man sich folgender Hilfsmittel, siehe Giloi [B-10] :

DEFINITION 2.3: *Ein INTERPRETATIONSSYSTEM ist ein geordnestes Paar, (L,P), wobei L als eine SPRACHE bezeichnet wird, und P ist ein (abstrakter) PROZESSOR, durch den Darstellungen in L transformiert werden können.*

P gilt entweder als Übersetzer oder Interpreter; zur Verdeutlichung wann und wie benötigen wir:

DEFINITION 2.4: *Eine geschichtete Hierarchie von Interpretationssystemen ist eine Folge von Interpretationssystemen (L_0,P_0), (L_1,P_1), ..., (L_m,P_m) die derart beschaffen ist daß*

(i) wenn P_i ein Übersetzer ist, dann besteht die Bearbeitung einer einer Darstellung in L_i durch P_i in der Erzeugung einer vollständigen Darstellung in L_{i+1}, und

(ii) wenn P_i ein Interpreter ist, dann besteht die Bearbeitung einer Darstellung in L_i durch P_i in der Erzeugung einer Zwischendarstellung L_{i+1}, die eine Bearbeitung der Darstellung in L_i durch den Prozessor P_{i+1} zulässt.

Für die Anwendung dieser Vorstellungsrahmen werden Teile von §2.2.1 im Voraus aufgegriffen: Evolutionsprozesse werden durch die enge Verzahmung zwischen Energie- und Materiedichten beschrieben, wobei die energetische Betrachtung als die Phänomenologie ausgelegt wird. (In Abb. 2.1 sind die Effekte ε_a, ε_{bc}, $a,b,c \geq 2$ die hier gemeinte Phänomenologie). Zur Anpassung an Definition 2.3 und Definition 2.4 setzen wir:

L	=	Sprache	=	Phänomenologie eines Prozesses
P	=	Übersetzer/ Interpreter	=	Materieanhäufung (-Population) - Zahl der Materie, die am Prozess beteiligt ist.

Die Transformationen in L entsprechen energetischen Transformationen, während die Verarbeitung in P den Veränderungen an Materiepopulationen entsprechen, die die energetischen Umwandlungen begleiten.
Die Bedingungen von Definition 2.4 werden im Zusammenhang mit dem algorithmischen Charakter eines hierarchischen Modells verdeutlicht: Hierzu zuerst:

DEFINITION 2.5: *Ein Algorithmus ist eine 4-Elemente Menge* $(Z, \mathcal{I}, \mathcal{O}, f)$ *mit folgender Eigenschaft, daß*

$$f : (\mathcal{I} \cup Z) \longrightarrow (Z \cup \mathcal{O})$$

eine ÜBERFÜHRUNGSFUNKTION heisst, wobei $\mathcal{I}$ *,* $\mathcal{O}$ *Ein- bzw Ausgabemenge, eindliche Mengen sind, während* Z *, Menge von Zwischenergebnissen, eine endliche oder unendliche Menge sein kann.*

Ein Beispiel ist die gewöhnliche Iteration (ein rekursiver Prozess) der Numerik, wobei im allgemeinen der Anspruch $f : (\mathcal{I} \cup Z) \longrightarrow (Z \cap \mathcal{O}) (\subset Z \cup \mathcal{O})$ gestellt wird (Konvergenz einer Iteration zu einem endlichen Wert). Dafür ist allerdings notwendig: $Z \cap \mathcal{O} \neq \phi$. Mit anderen Wörten, $\mathcal{O}' \subset Z$, $\mathcal{O}' \subseteq \mathcal{O}$ ist zulässig. Für verschiedene Aufgabe, wie unten ersichtlich wird, ist es wünschenswert $\mathcal{I}' \subset Z$, $\mathcal{I}' \subseteq \mathcal{I}$ zuzulassen; (in solchen Fällen wird von selbsreproduzierendem Algorithmus gesprochen, wofür das Konzept von selbstreproduzierenden Kernen ein verwandter Begriff darstellt). Demenstsprechend lässt sich die Überführungsfunktion f in Definition 2.4 einfacher schreiben als $f : Z \rightarrow Z$.

Mit Hilfe eines Algorithmus lassen sich die Beziehungen zwischen zwei Interpretationssystemen herstellen. Betrachten wir dies am Beispiel von Abb. 2.11, wobei das Dualsystem für die energetischen Betrachtungen durch e, e_i, --- usw bezeichnet wird: Setze (unter Voraussetzung der Bezeichnungen in Abb. 2.8 bis Abb. 2.10):

$$(L_o, P_o) \equiv \{(L_{o1}, P_{o1}), \text{-----}, (L_{om}, P_{om})\}$$

$$(L_{oi}, P_{oi}) \equiv \{(\tilde{\xi}_1, \ldots, \tilde{\xi}_4), \underbrace{(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2)}_{\text{Elemente des Seeligschen Modells}}\}$$

(- die unterste Ebene in Abb. 2.

$$(L_1, P_1) \equiv \{(L_{11}, P_{11}), \text{-------}, (L_{1m}, P_{1m})\}$$

$$(L_{1i}, P_{1i}) \equiv \{(\xi'_{11}, \rho'_{11}), (\xi'_{12}, \rho'_{12})\}$$

(die 2. Ebene von oben in Abb. 2.

$$(L_2, P_2) \equiv \{(\xi'_1, \rho'_1), \text{-------}, (\xi'_m, \rho'_m)\}$$

(die 3. Ebene in Abb. 2

$$(L_3, P_3) \equiv (\mathcal{E}', \mathcal{P}')$$

NB: Für die Seeligsche Aufgabe, modelliert nach der Nervenfaser, gilt $m = 9$, siehe unten.
Demnach ist

$$\mathcal{Z} \triangleq \{(L_0, P_0), (L_1, P_1), (L_2, P_2), (L_3, P_3)\}$$

$\vartheta \triangleq (L_3, P_3) \subset \mathcal{Z}$ — das Maß mit dem das Verhalten eines Gebildes wie in Abb. 2.8 (vgl. Abb 1.2) bemessen wird

$$\mathcal{J} \triangleq \mathcal{Z} \setminus \vartheta \subset \mathcal{Z}$$

Definiere

$$f_i : \triangleq (L_{oi}, P_{oi}) \times (L_1, P_1) \longrightarrow (L_2, P_2)$$

$$\tilde{f} : (L_1, P_1) \times (L_2, P_2) \longrightarrow (L_3, P_3)$$

Demnach ist $f : \mathcal{Z} \longrightarrow \mathcal{Z}$ mit $f \triangleq \tilde{f} \circ (f_1, \ldots, f_m)$ die Definition von den Parallel-Programme in Abb. 2.11 als eine (abstrakte) Rechenanlage.

Es ist daher ersichtlich, daß sich die Methoden der hierarchischen Modellierung durch starken algorithmischen Einschlag auszeichnen. Durch die Parallelität der zu betrachtenden Verarbeitung werden Modelle für beliebige Prozesse zu 'autonomen' verteilten Systemen (siehe Giloi B-10); deren Anreicherung durch Überlegung der Mechnik, siehe Mbaeyi [C-19] und §2.2.1 unten, schafft einen neuen Gesichtspunkt bezüglich 'Quantisierung' von Prozessen.

In jüngster Zeit wird auch die Notwendigkeit der obigen Ausführungen für Probleme der chemischen Systeme anerkannt; hierzu Varmuza [B-39] :

> 'Automated instruments and the neccessity to work on complex problems enhanced the development of automatic methods for the reduction and interpretation of large data sets. Numerous methods from mathematics, statistics, information theory, and computer science have been extensively investigated for

the elucidation of chemical information; a new discipline ''chemometrics'' has been established.
'Three different approaches have been used for computer-assisted interpretation of chemical data. 1. Heuristic methods try to formulate computer programs working in a similar way as a chemist would solve the problem. 2. Retrieval methods have been successfully used for library search (as an unknown spectrum is compared with a spectral library. 3. Pattern recognition methods are especially useful for the classification of objects (substances, materials) into discrete classes on the basis of measured features. A set of characteristic features (e.g. a spectrum) of an object is considered as an abstract pattern that contains information about a not directly measurable property (e.g. molecular structure or biological activity) of the object. Pure pattern recognition methods try to relationships between the pattern and the 'obscure property' without using chemical knowlegde or chemical prejudices.'

Für die Zerlegungen, die den hiessigen ähnlich sind verweisen wir auf Varmuza [B-39] Seite 72ff. Die von Varmuza angesprochene Notwendigkeit, mehrere Gebiete heranzuziehen, wird auch in nachfolgenden Kapiteln geschehen. (Für die reine abstrakte mengentheoretische Behandlung von Synchronizierung mehrerer Komponenten zu kooperativen Verhalten wird auf Butterworth [N-24] verwiesen).

2.1.4: ANWENDUNG: CHEMISCHE ELEMENTARPROZESSE AUS DER SICHT ME:TECHNISCHER ERFASSUNG KOOPERATIVER PROZESSE

Der Einfachheit halber wird das Wort 'Lasern' (im englischen 'Lasing') benutzt, um die Erzeugung von Lasern zu kennzeichnen; in diesem Zusammenhang wird auch von 'laserfähigen Zuständen die Rede sein.

Aus Kapitel I geht eindeutig hervor, daß die chemische Kinetik ein wesentlicher Faktor für die positive Realisierung von Frage F2 ist. Sie (die chemische Kinetik) ist die Kennzeichnung für die Interaktionen - Reaktionen genannt - unter chemischen Spezies, wobei jedem chemischen Element bzw. Spezies phänomenologische Identifikationen und Materieeiegenschaften zugeordnet werden.
Pänomenologische Identifikationen beziehen sich u.a. auf jene physikalische Eigenschaften, die gewöhnlich mit der Entstehung von elektrischen und magnetischen Erscheinungen, Temperatur, Druck usw direkt assoziert werden können, während Materieeigenschaften sich auf die gewöhnlichen Größen, Masse, Gewicht, Dichte, Konzentrationen beziehen; (für die quantitativen Beziehungen unter den

phänomenologischen Identifikationen wird auf de Groote und Mazur [A-14] verwiesen). Für chemische Spezies, die üblicherweise in der Gestalt von molekularen Gebilden (fortan als molekulare Aggregate bezeichnet) betrachtet werden, ist die Kernladung (Elekronenanzahl in einem molekularen Aggregat) die am häufigsten betrachtete phänomenologische Identifikation, während die Materieeigenschaft eines molekularen Aggregats durch Masse bzw. Konzentration (Anzahl von Molekulen pro Raummaß - Volumen/Fläche/Länge) gekennzeichnet wird, siehe Hartman [A-27] , und auch Borell [A-4] , Hammes [A-25] , Nicholas [B-26] , Spinks et al [A-65]
Ist X_K ein molekulares Aggregat (in Konzentrationen gemessen), dann sind Reaktionen gründsätzlich von 3 Typen:

$$X_K \rightleftharpoons X_{K'}$$ - Umwandlung eines Moleküls

$$X_K \rightleftharpoons X_{K'} + X_{K''}$$ - Zerfall, Rekombination, Addition

$$X_K + X_{K'} \rightleftharpoons X_{K''} + X_{K'''}$$ - Substitution, Austausch, Umbau

Dabei spielt die Energie $\mathcal{E}(R)$ des Moleküls als Funktion der Kernlage im Raum eine große Rolle, siehe Hartmann [A-27] ; sie wird stets geänderts als Folge einer der oben genannten Reaktionstypen.

Daraus folgt: Reaktionen sind durch die ihnen begleitenden Phänomenologie der Energieumwandlungen erkennbar (beobachtbar), siehe Hammes [A-25] . Eine Theorie der (räumlich-zeitlichen Energietransformationen ist daher eine Darstellung von chemischer Kinetik in Gestalt von beobachtbaren Größen, da es häufig schwierig ist, die Konzentrationen selber direkt zu messen.

Das Seeligsche Modell wird in nachfolgenden durch Energiebetrachtungen (als Hilfsmittel) ergänzt.

Von besonderen Interessen für die Probleme dieser Arbeit sind Reaktionen, die chemisches Lasern erzeugen, d.h. Reaktionen, die Populationsinversionen bewirken. Diese sind bestimmte exotherme Reaktionen, siehe Airey [E-2] , Hammes [A-25] - Chemolumines-

zenz-Reaktionen (auch Fluoreszenz-Reaktionen genannt), die sich, als exotherme Reaktionen, durch Strahlenemission auszeichenen. Dabei ist die Strahlenemission die Folge der Bildung von Produkten (Populationen), die gegenüber der Umgebung instabil sind, siehe z. B. Nicholas [B-26] , Spinks et al [A-65].

Jedem Molekül werden vier charakteristischen Energien zugeordnet: Elektronische, Schwingungs-, Rotations-, und Translationsenergien, für die bestimmte strukturelle Konfigurationen erforderlich und maßgeblich sind.

DEFINITION 2.6: *Der Grundzustand einer chemischen Species ist die elektronische Energie gepaart mit einer Menge von Schwinguns-, Rotations-, und Translationsenergieen, für die die Spezies stabil ist.*

Chemische Spezies können einen oder mehrere Grundzustände haben, siehe Delcroix [C-6] , Kauzmann [A-34].
Daher hat ein chemisches Spezies mehrere Umwandlungsmöglichkeiten: Dabei ist Chemoluniszenz bzw. Fluoreszenz als Rückkehr zum nächsten Grundstand, begleitet durch Strahlenemission, eine dieser Alternativen. Die restlichen sind:

a) Interne Umwandlungen - Für eine vorgegebene elektronische Energie können zwischen Schwingungs-, Rotations-, und Translationsenergien umgewandelt werden, mit oder ohne Strahlungsemission; wie in §2.2.1 ersichtlich wird sind diese Alternative angereichert durch die Alternativen, die die 'Flußenergien' bieten.
b) Störungen der elektronischen Energie mit folgenden alternativen Konsequenzen:
   1) Übergang, mit oder ohne Strahlung, in neue elektronische Energiekonfigurationen,
   2) Energieteilung bzw. -Abgabe, meistens ohne Strahlung, möglichst an benachbarte Moleküle, und
   3) Zerfall (unimolekulare Reaktion) des Moleküls mit Energieteilung, bzw. -Abgabe unter den resultierenden Produkten als Folge.
c) Reaktionen mit anderen Molekülen (chemische Kinetik).

Für Einzelheiten wird auf Spinks et al [A-65] verwiesen. Welche der obigen Alternativen eintritt, hängt auch im wesentlichen von Umgebungseinflüssen ab, zum Beispiel Pumpaktionen.

Für das weieter wereden folgendes als die 'operative Logistik laserfähiger Reaktionen' festgehalten:

OLLR-2: *Reaktionsfähige Dichte von chemischen Spezies führen einen exotherme Reaktion aus.*

OLLR-3: *Reaktionsenergie (z.B. Wärme) bewirkt energetische Anregung von resultierenden molekularen Gebilden (Reaktionsprodukten).*

OLLR-4: *Führt die Anregung zu einer Populations- und Energiedichte, die über dem Grundstand liegt (also über dem Gleichgewichtszustand der Umgebung gegenüber), dann wird das entstandene Energie- und Populationsdichtegefälle ein laserfähigen Zustand genannt.*

OLLR-5: *Lasern (Strahlungsemission), als Rückkehr zum Grundzustand, bedeutet die Beseitigung des Populations- und Energiegefälles.*

Offenbar unterscheiden sich zwei Zustände eines molekularen Aggregates wie folgt:

a) durch den energetischen Zustand des Prozesses (zum Beispiel die absolute Temperatur), und

b) durch zwei relative Populationsdichten, die durch einen spezifischen Energieunterschied bzw. Lücke gekennzeichnet ist.

Damit is die Schaffung von reaktionsfähigen Dichten (OLLR-2) ein entscheidender Punkt für die Schaffung von laserfähigen Zuständen. Schließt man autokatalytische Selbstreplikationen aus (wie in dieser Arbeit), dann bleibt nur noch

OLLR-1: *Die Schaffung von reaktionsfähigen Dichten erfolgt durch Pumpaktionen - äussere Einflußnahme in der Form von Zu- und/oder Abfuhr von Materie (d.h. chemischen Spezies) und/oder Energie.*

Im Seeligschen Modell (siehe Abb. 1.1a) gibt es nur Materiepumpaktion, die durch j_1 und j_2 gekennzeichnet sind, und die in den Identitäten (1.3), (1.5), (1.7) und (1.8) in den Gliedern ϕ und χ enthalten sind.

Kombiniert man Abb. 1.1 und Abb. 1.2, ergeben sich folgende Pumpaktionen als mögliche Alternative für das erweiterte Seelische Modell (Seeligsche Reaktions-Diffusions-Schema):

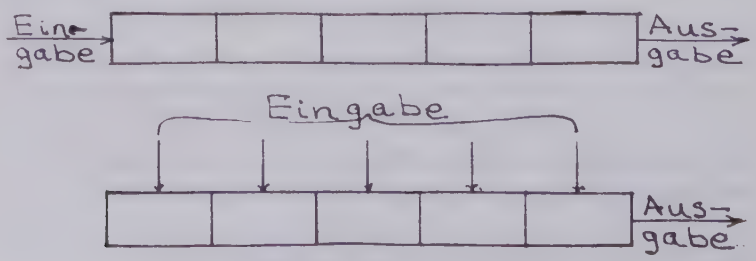


Abb. 2.12

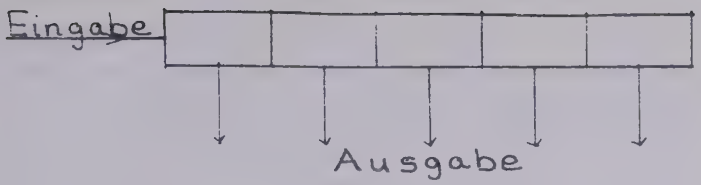


Abb. 2.13

Abb. 2.12 und Abb. 2.13 entsprechen einigen operationellen Konfigurationen für Ladungstransportbauelemente (CTD - 'Charge Transfer Devices', manchmal auch CCD - 'Charge Coupled Devices' genannt) in den Moden SI/SO ('Series Input - Series Output', Abb. 2.12a), PI/SO ('Parallel Input - Series Output', Abb. 2.12b) und SI/PO ('Series Input - Parallel Output', Abb. 2.13), siehe Barbe et al [E-6]; diese operationellen Konfigurationen lassen sich zusammenfassen zu Verarbeitungseinheiten (siehe Barbe et al [E-6]) wie in Abb. 2.14 unten:

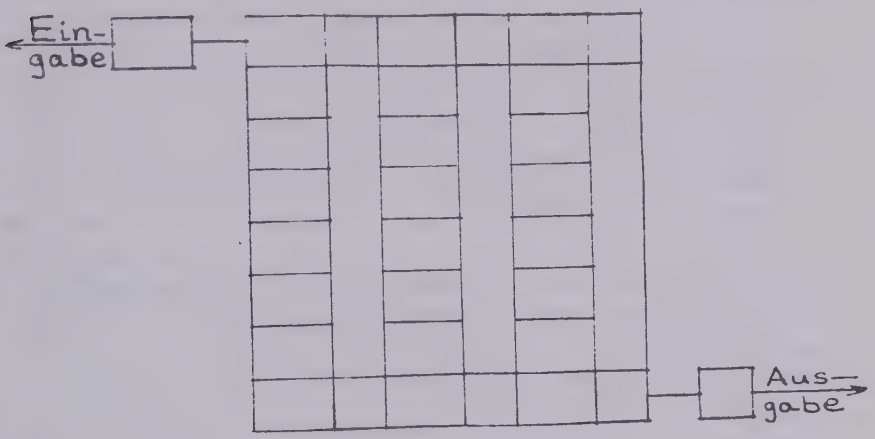


Abb. 2.14

Konfigurationen wie in Abb. 2.14 werden hier eine wichtige Rolle spielen, zwar bezüglich der Konstruktion von möglichen Verarbeitungseinheiten mit Seeligschen Kette (wie in Abb. 1.2) als Bauelement; (Konfigurationen wie in Abb. 2.14 liegt den Entwurfen von 'Chips' in der Mikroprozessentechnologie zugrunde, siehe Giloi [B-10].

Also liegt es näher, das Seeligsche Reaktions-Diffusions-Schema

als ein denkbares chemisches Informationsverarbeitungsgerät zu betrachten. Dabei treten zwei Klassen von Problemen auf:

PROBLEM P1: DA LAERN ZWEI EINDEUTIG UNTERSCHEIDBARE, ABER BENACHBARTE ZUSTÄNDE BRAUCHT, IST EIN REINES REAKTIONS-DIFFUSIONS-SCHEMA NACH DER ART DES KLASSISCHEN WÄRMELEITUNGSPROBLEMS NICHT SEHR GEEIGNET. BEKANNTLICH IST DIESES KLASSISCHE DIFFUSIONSPROBLEM NICHT EIN MECHANISMUS DER MATERIE- ODER ENERGIEAKKUMULATION (D.H. ENERGEIE- BZW. MATERIEANHÄUFUNG) SIEHE COPELAND [C-5]

Dieses Hindernis wird durch Heranziehung von einem nichtlinearen Modell und der Einführung des Konzepts von 'Saltatorischer Diffusion' behoben, siehe §2.2 unten. Hilreich dabei sind zwei Erkenntnisse:

a) Diffusionsprozesse sind nur δ-Null steuerbar (siehe Mbaeyi [A-39] und [A-40]) in dem Sinne, daß sie in endlicher Zeit nur in eine Umgebung (Radius $\delta \geq 0$) eines gewünschten Gleichgewichts- bzw. Grundzustandes hingesteuert werden können. In der Steuerungstheorie (Theorie der Steuerung von dynamischen Prozessen) ergibt sich daraus die Klasse von Problemen, die als 'Sub-Optimal Control Problems' bezeichnet werden, siehe z. B. Wang [N-25] für eine eingehende Übersicht. Für die Aufgabe hier ist nur folgende Schlußfolgerung von Interesse: Es gibt Restzustände, die durch Diffusion geschaffen werden.

b) Kolmogoroff et al konnten 1937, siehe Scott [A-58] , beweisen daß Reaktions-Diffusions-Systeme zu besonderen Wellenverhalten fähig sind, wenn sie die Einwirkung von bestimmten Impulsfolgen (d.h. Folge von Pumpaktionen) von aussen ausgesetzt sind, siehe auch Tuckwell [C-23] . Aus der Arbeit von Kolmogoroff und den anderen dannach geht nicht eindeutig explizit hervor, ob ihm und anderen dannach die eben erwähnten Sub-Optimalitätsprobleme bei der Steuerung von Diffusion bekannt waren. Auf jeden Fall lässt sich das Ergebnis von Kolmogoroff durch diese Sub-Optimalitätseigenschaft erklären: Eine geeignete Folge von Impulsen (Pumpaktionen) kann zur Verstärkung von Restzuständen (durch Akkumulation) führen, mit dem Ergebnis, daß Energie- und Populationsdichten geschaffen werden können, die besondere Verhaltenseigenschaften aufweisen.

In diesem Sinne ist die Seelische Vermutung, die sich in den Fragen Fragen F1 und F2 niederschlagen, berechtigt. Für ihre positive Untermauerung werden neue bzw. erweiternde Betrachtungen über Diffu-

sions- und Relaxationskeoffizienten herangezogen, §2.2.2.

PROBLEM P2: EIN LAERFÄHIGER ZUSTAND SETZT ZWEI ZUSTÄNDE VORAUS - EIN INSTABILER (ANGEREGTER ZUSTAND) UND EIN STABILER (GRUNDZUSTAND). ANDERSEITS, EIN COMPUTERGEDÄCHTNIS-ELEMENT SETZT ZWEI GLEICHGEARTETE ZUSTÄNDE VORAUS - ZWEI STABILE -, DIE STETS DURCH EINEN INSTABILEN GETRENNT SIND.

Das durch Problem P2 gekennzeichnete Hindernis wird mit Hilfe von 'Five State-Automaton'-Prinzip der Evolution (siehe Mbaeyi [C-19]) ausgeräumt- Alle Erläuterungen mit entsprechenden Abbildungen erfolgen an geeigneten Stellen in §2.2 und §2.3.

Betrachtet man die Abbildungen 2.12 und 2.13 als denkbare Alternativen, wobei allerdings später die Betonung auf Abb. 2.12b und Abb. 2.13 liegen werden, siehe §. 2.3, so sind zwei Voraussetzungen für Frage F2 unentbehrlich:

a) die Betrachtung von kooperativ parallel-ablaufenden Prozessen,
b) ein Maß zu Feststellung des erreichten integrierten Zustands, als Ausdruck der kooperativen Vorgänge.

Also, ein hierarchisches Modell ist erforderlich, wie schon in §2.1.3 erörtert wurde. Mit anderen Wörten, die chemische Kinetik, die die positive Beantwortung von Frage F2 ermöglicht, ist aus der Sicht der kooperativen Phänomene zu betrachten, damit integrierte Zustandsvorstellungen ermittelt werden können.

ANMERKUNG 2.7: Die Lösung, die hier für Frage F2 aufgezeichnet wird, geschieht in der Form von energetischer Aufladbar- und Entladbarkeit mittels chemischer Kinetik. Zwar entsteht ein chemisches Ssytem, das neue Perspektiven in der Informationsverarbeitung öffnet, wenn es empirisch realisierbar wird. Allerdings darf daraus keine unmittelbare weitreichende Schlußfolgerungen über chemische Informationskodierung bzw. -Wiedergabe in biologischen Systemen gezogen werden. Nicht nur weil die hier erreichte Lösung ein Sonderfall eines Teilbereiches der allgemeinen biologischen Gedächtnisprozesse ist. Sondern auch durch die Tatsache, daß es bezüglich der benötigten operationellen Logistik einen wesentlichen Unterschied gibt. Die hier zu erzielende Lösung bedarf des NRZ-Operationsmoduses, siehe Middeelhoek et al [E-39] und §2.2.4, während der RZ-Modus im allgemeineren Fall vorherrscht. Während die Voraussetzungen, die gleich unten in §2.2.1 erörtert werden, ausreichen, um Frage F2 zu behandeln, sind im allgemeinerem Fall weitere Vorbedingungen erforderlich, siehe Mbaeyi [A-43] bis [A-45] .

Als Folge von Anmerkung 2.7 wollen wir festhalten: Die hier zu erzielende Lösung ist keine globale Lösung des Gedächtnisproblems in der allgemeineren Evolution. Sie beschränkt sich lediglich da-

auf die Aufzeichnung der Möglichkeit, (optische) Informationsverarbeitung mittels chemischer Kinetik (von Halbleiteraggregaten) zu realisieren.

2.2: Allgemeine Voraussetzungen aus der Sicht der nichtlinearen Formulierung von Evolutionsproblemen

Hilfskonzepte, mit deren Hilfe ein Modell für Frage F2 entsteht, werden hier eingeführt; es sind vor allem knappe Erläuterungen von einigen Aspekten nichtlinearer feldtheoretischer Betrachtungen (beschränkt auf den hiesigen Bedarf), von Diffusions- und Relaxationskoeffizienten als wichtige innere Parameter, von Gedächtnistypen. Ferner wird auch die Rolle von Flip-Flop in Selbstorganization ansgesprochen, und im Zusammenhang mit den feldtheoretischen Betrachtungen werden Multistabilität und der Veränderbarkeit von Prozessverhalten angeschnitten.

Ziel ist die direkte Konstruktion eines nichtlinearen hierarchischen Modells (nach Abb. 2.10) für die hiesige Aufgabe. Dies ist notwendig wegen der starken Abweichungen, die auftreten, wenn versucht wird, Übergänge zwischen bestimmten (gewünschten) Zuständen - 'Steady States' nur mit Hilfe von gestörten Formen der Steady-State-Gleichungen zu beschreiben; hierzu Resch at al [B-30]:

> 'Crystal state theories are based on the concept of the ideal crystal. This is as is well known incapable of existence for various reasons (..). A real crystal is described in terms of departues from ideality by introducing 'defects' and thus allowing for the 'imperfections' of nature. This approach becomes the more problematic, the greater the depatures from the idealized model.'

(Da die Ansichten von Resch et al mit denen des Verfassers im Hinblick auf die Notwendigkeit hierarchischen Betrachtungen für kooperative Vorgänge übereinstimmen, erfolgen auch weitere Zitate aus ihrer Arbeit).

2.2.1 WESENTLICHE ELEMENTE EINER NICHTLINEAREN FORMULIERUNG VON EVOLUTIONSPROBLEMEN

Wie in §2.1.4 offenkundig wurde, ist Energie (als Funktion von Ort und Zeit) eines chemischen Prozesses ein wichtiger Faktor für die Beobachbarkeit und Beurteilung des kooperativen Zustandes einer chemischer Kinetik, siehe Resch et al [B-30] . Ausgehend von

von energetischen Betrachtungen bildet man die Grundlage einer nichtlinearen feldtheoretischen Formulierung eines Prozesses wie folgt:

Es wird angenommen, der Prozess sei in $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $1 \leq d \leq 3$, $\partial\Omega$ Rand von Ω, enthalten; dann:

a) Die Energie, als die Hamiltonische Funktion des Prozesses vorausgesetzt, wird dargestellt als:

$$E \equiv E^{(0)} + E^{(1)} + \alpha E^{(1)} E' \tag{2.1}$$

$$E^{(1)} \equiv E_M^{(1)} + E_F^{(1)} + \tilde{\alpha} E_M^{(1)} E_F^{(1)} \tag{2.2}$$

Die Glieder auf der rechten Seite von den Identitäten (2.1) und (2.2) bedeuten:

- $E_M^{(1)}$ - ist die Bewegungsenergie (im Sinne der klassischen Mechanik diskreter Systeme
- $E_F^{(1)}$ - ist die Fließenergie (d.h Energie der räumlichen Ausdehnung/Ausbreitung im Sinne der klassischen Mechnik des Kontinuums)
- E' - ist die Energie der Umgebung - $\mathbb{R}^d \setminus (\Omega \cup \partial\Omega)$; sie kann auch wie E untergliedert werden.
- $E^{(0)}$ - Wenn nicht Null, kennzeichnet eine Art Eigenenergie des Prozesses
- $\alpha, \tilde{\alpha}$ - sind Parameter, die durch empirische bzw. numerische Versuche festzustellen sind.

Für Probleme der klassischen Mechnik diskreter Systeme gilt $E_F^{(1)} = 0$, $E^{(0)}$ = Potentialenergie und $E_M^{(1)}$ ist die kinetische Energie und $\alpha E_M^{(1)} E'$ bezieht sich offenbar auf den Verlust oder Gewinn von kinetischer Energie der Umgebung gegenüber.

Für Probleme der klassischen Kontinuumsmechanik gelten $E_M^{(1)} = 0$; $E_F^{(1)}$, $E^{(0)}$ und $\alpha E_F^{(1)} E'$ haben Bedeutungen wie oben.

Für die Mechanik molekularer Aggregate gelten zusätzlich:

$$E_M^{(1)} \equiv E_{M,V}^{(1)} + E_{M,R}^{(1)} + E_{M,T}^{(1)} \tag{2.3}$$

wobei $E_{M,V}^{(1)}$ die Schwinguns-, $E_{M,R}^{(1)}$ die Rotations- und $E_{M,T}^{(1)}$ die Translationsenergie darstellt.

E, die gesamte Energie des Prozesses, wird als die 'elektronische Energie' des Prozesses betrachtet; sie ist in verschiedenen Niveaus gestaffelt.

b) $\Omega, \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$ werden wie folgt zerlegt:

$$\Omega \subset \bigcup_{i=1}^{m} \Omega_i \qquad \partial\Omega \subset \bigcup_{i=1}^{m} \partial\Omega_i$$

$$\Omega_i \subset \bigcup_{j=1}^{n_i} \Omega_{ij} \qquad \partial\Omega_i \subset \bigcup_{j=1}^{n_i} \partial\Omega_{ij}$$

Diesen Zerlegungen werden die Energien E_i und E_{ij} zugeordnet:

$$E_i \equiv E_i^{(0)} + E_i^{(1)} + \alpha_i E_i^{(1)} E' + \sum_{\substack{i'=1 \\ i' \neq i}}^{m} \alpha_{ii'} \sum_{i'}^{(1)} E_{i'}^{(1)} \tag{2.4}$$

$$E_{ij} \equiv E_{ij}^{(0)} + \sum_{ij}^{(1)} + \alpha_{ij} E_{ij}^{(1)} E' + \sum \sum \alpha_{jj'} E_{ij}^{(1)} \left(E_{ij'}^{(1)} + E_{i'}^{(1)} \right) \tag{2.5}$$

Man beachte hier wie die Interaktionsglieder ausfallen, da für jedes i die restlichen i', und ggf E' die umgebenden Energien sind; analog für j, j'.
Für die stete Einbeziehung von energetischen Überlegungen bzgl. quantitativer Darstellung eines Evolutionsprozesses, und für die Zerlegungen von Hamiltonischen Funktionen bzw E , $E^{(1)}$ in verschiedenen Komponenten, zwecks Untersuchungen von kooepartiven Vorgängen auf molekularen bzw. atomaren Ebenen, siehe Devreese [A-13] , Emery [A-15] , Haken [A-23] , Hameka [A-24] , Kauzmann [A-34] , Kazanchian [A-35] , Persico [A-51] , Porter [A-53] , Clark [C-4] , Delcroix [C-6] , Mäkilä [C-18] Ben-Shaul [E-7] , Emmanuel [E-18] , Gross et al [E-21] Zeller [E-68] , Zewil [E-69] , Moore [N-22] .

c) Es werden folgende Hilfsfunktionen, die als 'verallgemeinerte Evolutionsfelder bezeichnet, eingeführt:

$$\theta = \frac{E}{V} = \frac{E}{N}\frac{N}{V} = e\rho$$

(2.6)
$$\theta_i = \frac{E_i}{V_i} = \frac{E_i}{N_i} \cdot \frac{N_i}{V_i} = e_i \rho_i$$

$$\theta_{ij} = \frac{E_{ij}}{V_{ij}} = \frac{E_{ij}}{N_{ij}} \cdot \frac{N_{ij}}{V_{ij}} = e_{ij} \rho_{ij}$$

Dabei sind V , V_i , V_{ij} die Raummasse (Volmen/Fläche/Länge je nach Problem) von Ω , Ω_i , bzw. Ω_{ij} ; N , N_i , N_{ij} bezeichnen jeweils die Population der Materie, die in Ω , Ω_i bzw. Ω_{ij} enthalten sind, so daß ρ , ρ_i , ρ_{ij} die Populationsdichte kennzeichnen.
Demnach stellen θ , θ_i , θ_{ij} und ihre Interaktionen eine engere Verknüpfung zwischen Energie- und Populationsentwicklung her (wie für die Frage F2 gesucht ist). Für die verzahmte Beziehung zwischen Energie- und Populationsentwicklung wird auf Delcroix [C-6] , Persico [A-51] (und die Literaturverzeichnisse dort) verwiesen; für den Einfluß von Raummaß auf das qualitative Verhalten von kooperativen Prozessen, siehe Adkins [D-1] , Allnatt [D-2] , Battino [D-7] , Boyd [D-12] , Cuddeback [D-17] , Jost [D-33] und [D-34] , Katz [D-38] , und speziell für die chemische Kinetik Battino, Boyd, Cuddeback und Katz wie gerade oben zitiert wurde.

Aus den Identitäten (2.6) folgen:

(2.7)
$$H = E = e\rho V$$
$$H_i = E_i = e_i \rho_i V_i$$
$$H_{ij} = E_{ij} = e_{ij} \rho_{ij} V_{ij}$$

Die Zerlegung bildet eine brauchbare geschlossene Zerlegung, wenn es Funktionen gibt, die die Übergänge zwischen den Hierarchie-Ebenen beschreiben, $H \longleftrightarrow H_i \longleftrightarrow H_{ij}$. Hierzu verfährt man wie folgt: Man beachte, daß die Funktionenmengen, die in den Zerlungen auftauchen, folgende Besonderheit aufweisen: Gegeben sei die Menge von Funktionen $\chi \longleftrightarrow (\chi_1, \ldots \chi_s) \in \mathbb{R}^s$. Definiere

$\chi \in \mathbb{R}$, $(\chi_1, \chi_2, \ldots \chi_s) \longmapsto \chi$ eine Funktion der Art, daß χ eine stückweise stetige, bifurkationsfreie Kurve darstellt. Die tragende Überlegung hier ist die: Ist das Zusammenwirken von $\chi_1, \chi_2, \ldots, \chi_s$ ein kooperativer Vorgang, so wird χ als eine stetige Funktion dieser Komponenten erzeugt, und damit als eine stetige Kurve darstellbar. Die Überlegungen führen zu quadratischen Formen, siehe Mbaeyi [C-19] für die detailierte Ableitungen. Bezogen auf e, e_i, e_{ij} u.s.w erhalten wir:

$$
\begin{aligned}
e &= (\mu + \tfrac{1}{m}) \sum_{i=1}^{m} e_i + \vartheta \sum_{i=1}^{m} e_i^2 \\
e_i &= (\mu_i + \tfrac{1}{n_i}) \sum_{j=1}^{n_i} e_{ij} + \vartheta_i \sum_{j=1}^{n_i} e_{ij}^2
\end{aligned}
\tag{2.8}
$$

$$
\begin{aligned}
\rho &= (\tilde{\mu} + \tfrac{1}{m}) \sum_{i=1}^{m} \rho_i + \tilde{\vartheta} \sum_{i=1}^{m} \rho_i \\
\rho_i &= (\tilde{\mu}_i + \tfrac{1}{n_i}) \sum_{j=1}^{n_i} \rho_{ij} + \tilde{\vartheta}_i \sum_{j=1}^{n_i} \rho_{ij}^2
\end{aligned}
\tag{2.9}
$$

In klassischen Modellen werden häufig $\mu = 0 = \tilde{\mu} = \mu_i = \tilde{\mu}_i$ und ϑ, $\tilde{\vartheta}$, ϑ_i, $\tilde{\vartheta}_i = 0$ gesetzt; die nichtlineare Beiträge versucht man dann später durch Störungstheorie, Renormalisierung usw einzufangen. Diese sind spezielle Fälle, wie unten gezeigt wird.

Eine nichtlineare Formulierung, die den Erfordernissen von offenen Systemen gerecht wird, muß die Umgebungseinflüsse beinhalten. Dies geschieht folgendermassen:

Unter Anwendung von (2.1) lautet

$$
\theta = \left(e^{\circ} + e^{(1)} + \frac{\alpha E^{(1)} E'}{N} \right) \rho \tag{2.10}
$$

Das Glied $\alpha E^{(1)} E' N^{-1}$ wird folgendermassen ersetzt:

$$
\begin{aligned}
\frac{\alpha E^{(1)} E'}{N} &= \alpha e^{(1)} e' N' \qquad \left(e' = \frac{E'}{N'} \right) \\
&= \alpha e^{(1)} e' \rho' \frac{V'}{V} V \\
&= \alpha e^{(1)} e' \rho' \frac{V'}{S} \cdot S
\end{aligned}
\tag{2.11}
$$

wobei S das Raummaß von $\partial\Omega$ ist. Während die 1. Alternative rein energetische Beeinflüssung einbettet, beinhalten die letzten zwei Alternativen die Raummasse als Parameter. Ferner enthalten sie auch ρ' - die Materiedichte der Umgebung -, und somit Materiezuflüsse (wie im Seeligschen Modell) als Enflußelement.
Es ist daher offenkundig, daß θ einen geeigneten Weg darstellt, um offene Systeme direkt in nichtlineare Formulierung darzustellen. Die betrachtete Lage ist bildlich in Abb. 2.15 dargestellt:

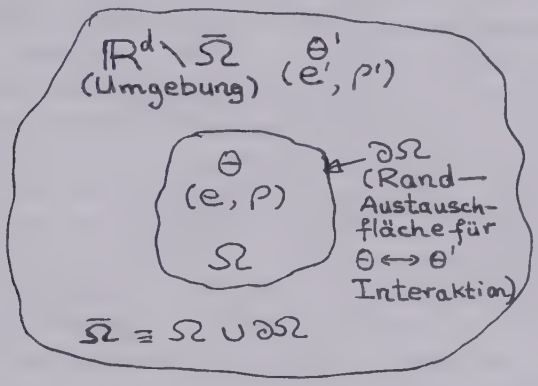


Abb. 2.15

Der Rand $\partial\Omega$ als Kontaktfläche spielt eine wichtige Rolle; da sein Maß zum großen Teil durch das Volumen von Ω bestimmt wird, ist die Betrachtung von Volumeinflüssen ein wesentliche Element nichtlinearer Theorie von Evolutionsprozessen.

ANMERKUNG 2.8: Genauso wie e, lässt sich ρ auch unterteilen in $\rho^{(0)}$ (Dichte der räumlich fixierten Materie), $\rho_m^{(1)}$ (Dichte der Materie in Bewegung), und $\rho_F^{(1)}$ (Dichte der Materie im Fluß). Auf diese Unterteilung wird hier nicht eingegangen, sofern sie nicht unbedingt eforderlich ist. Sie ist allerdings sehr güngstig für bestimmte Aufgabe, zum Beispiel puntierte Implantierung von Ionnen (Materiezuflüsse) in Festkörper - k-dimensionaler Leiter. Eine eingehende Behandlung dieser Methode im Sinne der N-Körperprobleme wird später in the Aufarbeitung von Mbaeyi [C-19] geboten.

Die voraussgegangenen Erörterungen wollen wir im Sinne der Seeligschen Aufgabe interpretieren; dazu betrachten wir Abb. 2.16 (vergleiche mit Abb. 1.1b):

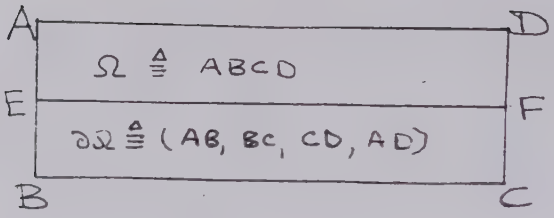


Abb. 2.16

Ist V das Raummaß von ABCD, E die Gesamtenergie, dann

$$N = (\xi_1 + \xi_2 + \eta_1 + \eta_2)\, V \tag{2.12}$$

$$\theta = \frac{E}{N} \cdot \frac{N}{V} = \frac{E}{N}\,\rho \tag{2.13}$$

$$\rho = \xi_1 + \xi_2 + \eta_1 + \eta_2 \tag{2.14}$$

Es seien V_1 , V_2 die Raummasse, die durch die Elemente $(\xi_1+\xi_2)$ und $(\eta_1+\eta_2)$ eingenommen werden; offenbar gelten:

$$\begin{aligned} N_1 &= (\xi_1 + \xi_2)\, V_1 \\ N_2 &= (\eta_1 + \eta_2)\, V_2 \\ V &= V_1 + V_2 \end{aligned} \tag{2.15}$$

So daß

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \xi_1 + \xi_2 \\ \rho_2 &= \eta_1 + \eta_2 \\ \rho &= \rho_1 + \rho_2 \end{aligned} \tag{2.16}$$

ANMERKUNG 2.9: V_1 und V_2 sind nicht notwendigerweise gleich und auch nicht mit AEFD, und EBCF zu verwechseln.

Die letzte Identität in (2.16) lässt sich leicht aus den Formeln in (2.9) ableiten: Da hier $m = 2$ ist, erhalten wir $\rho = \rho_1 + \rho_2$ durch die Wahl $\mu = 1/2$ und $\vartheta = 0$.

Die Interaktionsformel (2.8) und (2.9) gewinnen ihre volle Bedeutung im Zusammenhang mit der Betrachtung der chemischen Kinetik: Reaktionen, die nur Molekülumwandlungen entsprechen (§2.1.4) genügen offenbar (2.15) und (2.16) - Zustände der Massenerhaltung. Aber Reaktionen des Zerfalls, der Rekombinationen, Addition oder Substitution, Austausch und Umbau (§2.1.4) führen zusätzliche Konzentrationen ein. In diesem Fall muß man (ξ_1', ξ_2'), (η_1', η_2') und ζ betrachten, anstatt (ξ_1, ξ_2) und (η_1, η_2) allein. Da ζ durch Reaktion unter $\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2$ entsteht, kann es als Funktion von diesen aufgefasst werden. Also lässt sich die gesuchte Gesamtdichte als Funktion der Ausgangsdichte darstellen, am häufigsten als nichtlineare Funktion, siehe Gavalas [C-12] ; die Identitäten (2.8) und (2.9) sind Beispiele solcher nichtlinearen Funktionen. Somit sind die wesentlichen Grundzüge nichtlinearen Formulierungen als zutreffend für die hiesige Aufgabe anzusehen; weitere Gesichtspunkte erfolgen in nachfolgenden.

Ausgehend von der Betrachtung biologischer Prozesse sind folgende Überlegungen entscheidende Probleme der Evolutionsprozesse:

a) Die Konservierung von speziellen Zuständen, Steady States bzw. Schwellenzustände genannt, siehe Denbigh et al [A-11] und [A-12] , die einen nicht verschwindenden Gradienten der Umgebung gegenüber aufrechterhalten.
b) Die Mechanismen der Erhaltung bzw. Erneuerung eines Schwellenzustandes (verstanden als spezielle 'Steady States')
c) Die Randbedingungen, die einen Schwellenzustand existieren lassen.
d) Probleme der Übergänge zwischen Schwellenzuständen.

Offenbar sind die oben aufgezählten 4 Überlegungen auch zutreffend für die hier gegebene Aufgabenstellung. Die erste und letzte werden hier behandelt, während die anderen zwei in §2.3 angesprochen werden.

Für das weitere werden folgende Hilfsbegriffe benötigt:

DEFINITION 2.10: *Ein stationäre Zustand, STEADY STATE genannt, ist der Zustand für den*

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \qquad (2.17)$$

gilt.

DEFINITION 2.11: *Stationäre Zustände für die*

$$\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} = 0 \;\&\; \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} < 0 \text{ , oder}$$

$$\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} < 0 \;\&\; \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = 0 \qquad (2.18)$$

gelten, werden 'CONSERVATION THRESHOLDS' genannt.

DEFINITION 2.12: *Stationäre Zustände heissen 'TRANSITION THRESHOLDS', falls*

$$\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = 0 \qquad (2.19)$$

DEFINITION 2.13: *Stationäre Zustände heissen 'TRIGGER THREHOLDS' falls*

$$\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} > 0 \;\&\; \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = 0 \text{ , oder}$$

$$\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} = 0 \;\&\; \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} > 0 \qquad (2.20)$$

Zwei spezielle Zustände, der eine mit $(\partial^2 e/\partial t^2) < 0$ & $(\partial^2 \rho/\partial t^2) < 0$ und der andere mit $(\partial^2 \rho/\partial t^2) > 0$ & $(\partial^2 e/\partial t^2) > 0$ sind als 'verbotenen' Zustände anzusehen, siehe Mbaeyi [C-19] für analytische Begründung. (In den Definitionen 2.10 bis 2.13 haben wir lediglich die Extremaleigenschaften ableitbarer Funktionen sehr differnziert betrachtet).

In diesen Definitionen sind die stationären Zustände ('Conservation Thresholds' usw) nur makroskopisch durch (e, ρ) definiert. Allerdings werden sie getragen von verschiedenen Kombinationen interner (d.h. mikroskopischer) stationären Zustände, die ähnlich zu definieren sind wie in (2.17) bis (2.20). Beispiel für mikroskopische Zustände, die einen makroskopischen tragen, sind die Schwingungs-, Rotations- und Translationsenergien, die einem einzigen elektronischen Zustand zugeordnet werden, siehe Delcroix [C-6] , Hameka

[A-24] , Kauzmann [A-34] , Seelig [A-60] .

Für die hier gegebene Aufgabenstellung ist das entscheidend, was geschieht, wann ein stationärer Zustand gestört wird. Einer der folgende Verhaltensmuster ('Behavorial Structure') stellt sich ein:

BS-1: Der stationäre Zustand wird restauriet, ggf begleitet durch interne Umwandlungen - Stabilität eines stationären Zustands.

Beispiel ist die Stabilität eines elektronischen Zustands unter Variation der Roations-, Schwingungs- und Translationsenergien.

BS-2: Begleitet durch die Erzeugung eines Effekts, der Ausgangszustand wird vorübergehend durch Umbau zerstört, und dann wieder restauriert durch den Zerfall des Umbaus.

Dieses Muster kann zu dem Zyklus Umbau ⟶ Zerfall ⟶ Umbau ⟶ Zerfall ⟶ ..... führen; dieser Zustand ist im Zhabotinskii-System, in den Mechanismen der Fortpflanzung von Nervenimpulsen anzutreffen. Das letztere dient als Leitbild in dieser Arbeit.

BS-3: Begleitet durch die Erzeugung von phänomenologischen Effekten (z.B. Strahlungemission -Absorption, bzw. Wärmeabgabe -Aufnahme), wird der Ausgangszustand zu einem niedrigen oder höheren Zustand überführt.

Dies entspricht den Obergänge zwischen elektronischen Niveaus.

Offenbar ist BS-1 ein Sonderfall von BS-2. Diese Arbet wird dem Fall BS-2 gewidmet.

Angesichts der Anmerkung 2.7 soll hier unterstrichen werden, daß BS-2 auch ein Sonderfall von BS-3 ist. Die in Anmerkung 2.7 angesprochene Unterscheidung besteht hauptsächlich darin wie BS-3 erreicht und erhalten wird, im Gegensatz zu dergleichen für BS-2.

Diese Verhaltensmuster haben eins gemeinsam, nämlich

DEFINITION 2.14: *EVOLUTION (verstanden als die räumlich-zeitliche Verhaltensänderung von Vorgängen) entspricht den Übergängen zwischen makroskopischen und/oder mikrookopischen 'Conservation Thresholds' mit 'Transition Thresholds' und /oder 'Trigger Thresholds' als Zwischenzustände*

Ober das Wie, wird unten eingegangen, da 'Conservation Thresholds', und im allgemeinen stationäre Zustände, sowohl durch stehende Wellen (SW-Wellen) als auch durch laufende Wellen (TW-Wellen) charakterisziert werden).

Dies erfordert zwei Voraussetzungen:

a) Meßbare Effekte, wodurch die Obergänge wahrnehmbar sind, und
b) die Existenz von vielfachen Steady States (mikroskopisch und/ oder makroskopisch).

Beide sind empirisch gesicherte Feststellungen, siehe Delcroix [C-6] , und Kapitel 4 für den analytischen Beweis der Notwendigkeit von vielfachen Steady States für die Fähigkeit eines Systems sich zu adaptieren.

Die Obergänge sind von zwei Arten:

1) Obergänge zwischen stationären Zuständen gleichen Typus, und
2) Obergänge zwischen stationären Zuständen verschiedenen Typus.

Der Typus eines stationären Zustands wird durch die Kombination von den 2. Ableitungen von (e, ρ) gekennzeichnet, die dem Paar auszeichnen, wie auf der e - ρ Tabelle, Tabelle 1 auf Seite 53 zu sehen ist.

In dieser Arbeit wird nur die erste Art von Übergänge betrachtet; (die 2. Art beinhaltet zusätzlich die Probleme der Materialverformungen, auf die hier nicht eingegangen wird).

Die Kenntnis der Mechanismen der Obergänge ist wesentliche Voraussetzung für die gezielte Beeinflüssung von Prozessverhalten, wie es diese Aufgabenstellung erfordert. Hierzu ist folgender Grundprinzip erforderlich, siehe Mbaeyi [C-19] :

LEMMA 2.15: *Ein Evolutionsprozess im Sinne von Definition 2.14 ist ein '5-State-Automat'.*

(Für den Begriff von Automaten wird auf §A1 des Anhangs verwiesen). Lemma 2.15 wird an Hand von Verhaltensmuster BS-2 erläutert. Ausgehend von der biochemischen Evolution biologischer Systeme als Grundlage, sind folgende Voraussetzungen hierzu notwendig:

LEMMA 2.16: *Evolution hat folgende Charakteristika:*
a) sie ist kontinuerlich, und
b) sie äussert sich durch die eng verzahmte Wechselwirkung des Paares e *und* ρ.

(siehe Mbaeyi [C-19] für detailerte Erläuterung).

LEMMA 2.17: *Schwellenzustände ('Thresholds') sind gekennzeichnet durch Paare von stationären Zuständen für das Paar* (e, ρ) *und genügen*

a) $(\partial e/\partial t) = (\partial \rho/\partial t) = 0$ *und*

b) $(\partial^2 e/\partial t^2) \leq 0$ *und/oder* $(\partial^2 \rho/\partial t^2) \leq 0$

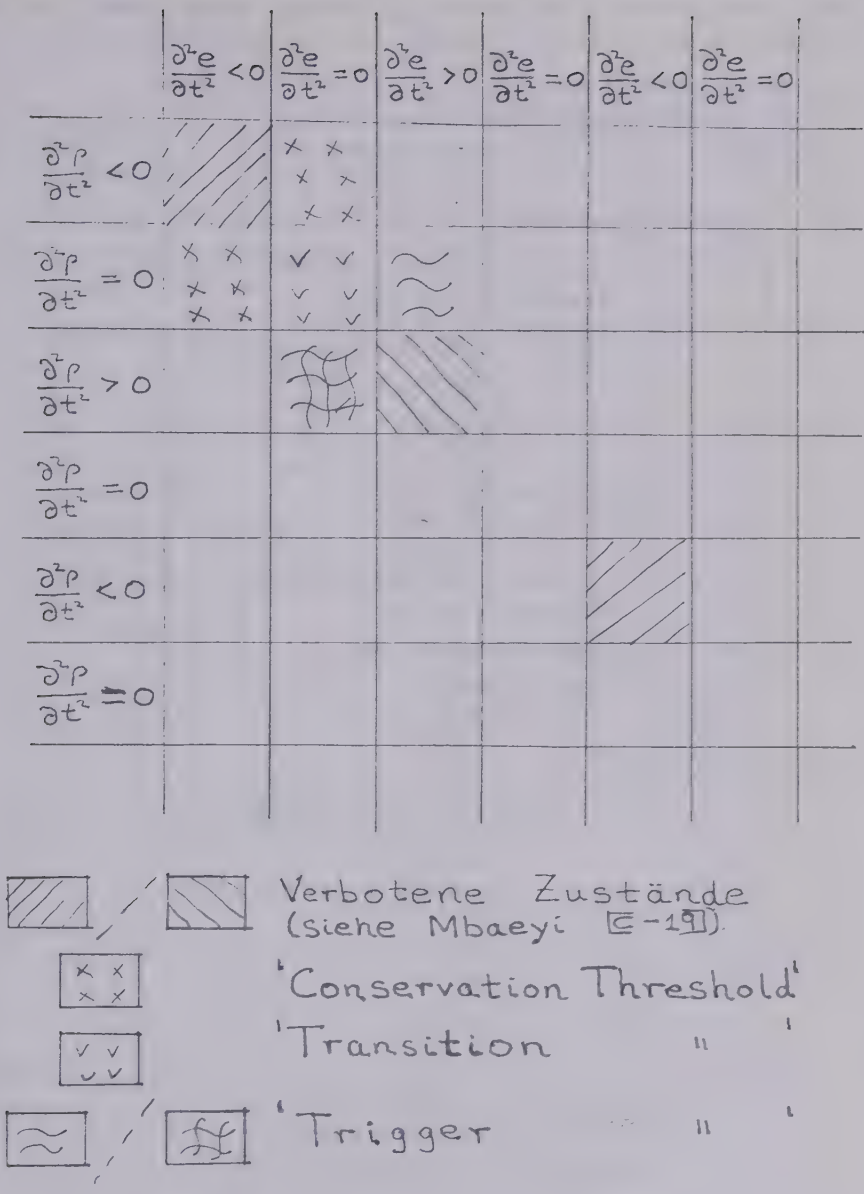


Tabelle 1

LEMMA 2.18: *Operationell vollzieht sich Evolution sequentiell im Sinne von nacheinander Aktivierung ihrer energetischen und materiellen Teile.*

Unter der Voraussetzung von Lemma 2.16 bis 2.18 ist Lemma 2.15 am einfachsten durch das nachfolgende Flußdiagram verdeutlicht:

A ≡ Anfangszustand ; B ≡ Zielzustand
Z ≡ beliebiger Schwellenzustand ('Threshold')
Z1, Z2, ... Zwischenzustände.

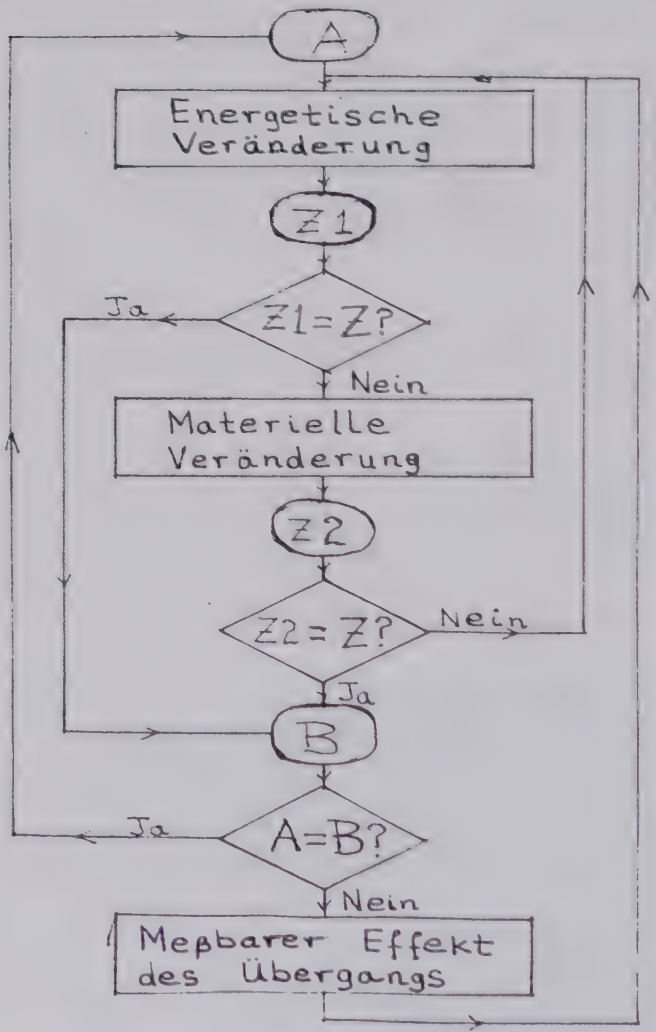


Abb. 2.17

Aus Tabelle 1 lässt sich schnell feststellen: Für Übergänge zwischen Schwellenzuständen gleicher Art sind jeweils 5 unterschiedliche

Zustände nacheinander beteiligt, (darum auch die Bezeichnung '5-State-Automat').

Die vorausgegangen Ausführungen werden auf die hier gestellte Aufgabe angewandt. Es lässtc sich leicht nachprüfen: Das Seeligsche Reaktions-Schema (Abb. 1.1a) entspricht dem Verhaltensmuster BS-2. Als Grundlage für laserfähige Verhalten muss es den Zyklus erfüllen:

Umbau ⟶ Zerfall/Rekombination ⟶ Umbau ⟶ Zerfall/ Rekombination.

Dies entspricht operationellen Vorgängen unter 5 Zuständen, wie in Abb. 2.18 verdeutlicht wird:

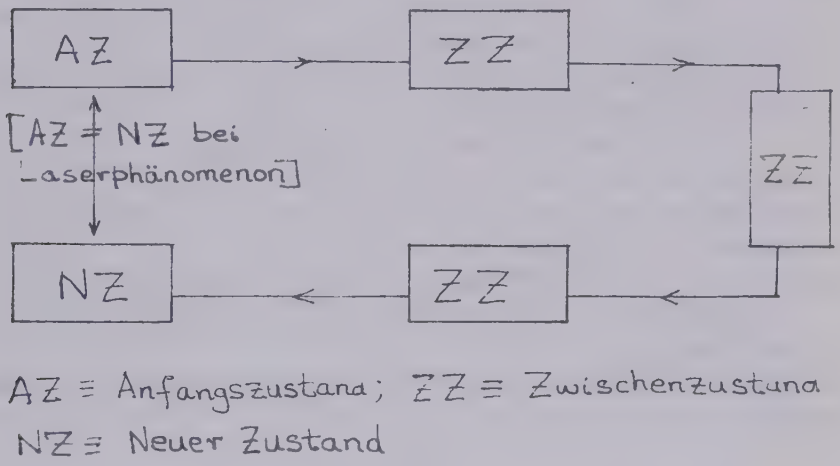


Abb. 2.18

Somit ist das '5-State-Automat'-Prinzip relevant für die Aufgabenstellung, die nun als Synchronisierung von '5-State-Atomata' aufgefasst werden kann.

ANMERKUNG 2.19: Bei chemischen Lasern zum Beispiel entspricht die 1. Häfte von Abb. 2.18 etwa Licht- bzw. Strahlungsabsorption, während die 2. Häfte die Licht- bzw. Strahlungsemission bedeutet, die die Populationsinversion beseitigt.

Unter der Voraussatzung von Lemma 2.18 erweist sich der in Abb. 2.18 aufgezeichnete Zyklus als zwei gekoppelte '5-State-Automata'. Dadurch werden neue Perspektiven über der operationellen Unterbau des Nervenimpulses gewonnen, siehe §2.3 unten.

ANMERKUNG 2.20: Wir errinern daran, daß die hier gestellte Aufgabe

aus der Beobachtung abgeleitet wurde, daß der Seeligsche Universaloszillator das Flip-Flop-Verhalten besitzt, und ist somit dem Computergedächtniselement verhaltensmäßig ähnlich, und daher als ein Turing-Element aufzufassen. Ein Turing-Element ist durch drei Zustände gekennzeichnet - 2 stabile Zustände und ein instabiler, der immer zwischen den beiden stabilen liegt. Dies ist ein Teil des in Abb. 2.18 abgebildeten Zyklus, wann nur die Anfangs- und Endzustände zusammen mit dem mittleren Zwischenzustand betrachtet. Mit anderen Wörten, das '5-State-Automat'-Prinzip beinhaltet das Turing- Prinzip, aber bedeutet zugleich dessen Erweiterung.

Die obigen sehr differenzierten Betrachtungen von stationären Zuständen bzw. Schwellenzuständen ('Thresholds') werden noch um einen Punkt erweitert: Stationaäre Zustande sind entweder durch stehende Wellen, SW-Wellen, ($\equiv$ analog von Rotation um einen fixierten Punkt) oder laufende Wellen, TW-Wellen, ($\equiv$ analog von Oszillationen bzw. Schwingungen). Dies ergibt sich aus folgender Tatsache, siehe Mbaeyi [C-19] :

a) Die gekoppelten nichtlinearen partiellen DGLen, die die räumlich-zeitliche Evolution von $e,\ e_i, e_{ij},\ \rho,\ \rho_i,\ \rho_{ij}$ $\forall\, i,j$ beschreiben, sind reine parabolische DGLen, falls man annimmt, das Geschehen in einem Prozess breite sich mit unendlicher Geschwindigkeit aus, d.h. mit zero Relaxationszeit (siehe §2.2.2).

b) Andersfall, unter der Annahme von nicht verschwindenden Relaxationszeiten, sind die beschreibenden DGLen parabolisch-hyperbolische DGLen.

Da $(\partial e/\partial t) = (\partial \rho/\partial t) = 0$ usw gelten für stationäre Zustände ergeben sich dann entweder elliptische DGLen (für SW-Wellen) oder hyperbolische DGLen (für TW-Wellen).
Ist ein Ausgangszustand - ein stationärer Zustand - durch SW-Wellen charakterisiert, dann besteht seine Veränderung in einer sich fortpflanzenden Ausbreitung, also in einen Übergang in einen dynamischen Zustand, Übergang zu TW-Wellen. Das Umgekehrte gilt für Ausgangszustände, die durch TW-Wellen charakterisiert sind.
Viele molekulare Umwandlungen, einschließlich chemischen Lasern, geschehen auf der Basis der Übergänge zwischen den Schwingungs- (dem TW-Wellen ähnlich) und den Rotationszuständen (dem SW-Wellen ähnlich).

Somit haben die Übergänge zwischen stationären Zuständen (Definition 2.14) einen eine weitere Charakteristik - das nacheinander Ablösen von SW-Wellen und TW-Wellen.
Für die Übergänge schafft dies ein Darstellungsproblem, nämlich

die Notwendigkeit der Lösung von Systemen von DGLen, in denen verschiedene Typen von DGLen gleichzeitig auftreten. Dies lässt sich allerdings durch die Heranziehung von Wellenfunktionenräumen beheben; auf dieser Grundlage entstehen abgeleitete DGLen - DGLen in Wellenfunktionenräumen wie in der Quantenmechnik. Durch die hierarchische Modellierung, die hier benutzt wird, ensteht eine hierarschische Unterteilung der Wellenfunktionenräume. (Auf eine eingehende analytische Behandlung dieser Vorteile wird in dieser Arbeit verzichtet).

Weitere Voraussetzungen folgen in den Abschnitten §§2.2.2 bis 2.2.5. Dieser Abschnitt wird mit Literaturverweisen abgeschlossen, die die obigen Ausführungen untermauern oder notwendig machen:

1) In chemsichen Systemen ist es unerläßlich, die enge Verbindung zwischen Energie- und Populationsdichten stets zu betrachten; hierzu Aroeste [A-3] , Clark [C-4] , Bowers [C-2] , Mäkilä [C-18] , Hameka [A-24] , Kauzmann [A-34] usw.
2) Die Notwendigkeit der Aufspaltung des Hamiltonians in verschiedenen Komponenten ist in zahlreichen Arbeiten anzutreffen; für die Fälle, die dem in dieser Arbeit beschrittenen Weg näher kommen, verweisen wir auf Rice [B-31] , Ververka [C-24] , Hameka [A-24] , Kazanchian [A-35] , Moore [E-41] , Moore [N-22] usw.
3) Die entscheidende Hilfe, die die hierarchische Formulierung für Untersuchungen der Verteilung der Zustände in chemischen Systemen leistet, wird zutreffend von Resch et al , siehe [B-30] zusammengefasst:

   '.....Regeln für die Energieverteilung zwischen den verschiedenen Ebenen werden angegeben. Anhand der mechanischen Deformation von Metallen wird demonstriert, daß die Energieänderungen in den einzelnen Ebenen in unterschiedlicher Weise die Änderungen der makroskopischen Eigenschaften bedingen.'

4) Für die Notwendigkeit nichtlinearer Modelle verweisen wir u.a. auf Feistel et al [C-9] , Kazanchian [A-35] .
5) Über die Notwendigkeit, spezielle Zustände und ihr vielfaches Vorhandensein zu betrachten, verweisen wir auf Chernavskii et al [C-3] Pismen [A-52] , Geisler et al [C-13] , Fromm [C-11] , Hoffmann [C-15] , Delcroix [C-6] ; (in Delcroix ist eine ausgedehnte Behandlung der Multistabilität in Ionensystemen vorzufinden).

Schwellenzustände ('Thresholds') wurden bis jetzt in der Literatur

häufig benutzt, ohne genauere Präzisierung und/oder Differenzierung. Klassisch geht der Schwellenzustandsbegriff (gegründet auf auf sogenannten quantummechanischen Schwellenzustand) auf Wigner, siehe [C-26] , zurück; er ist eine Gesetzmässigkeit, die auf die Variation des 'Querschnitts' eines exothermen Prozesses bzgl der Energie zurückgeht, wobei nur kleine Werte von $\tilde{E} + Q$ $\tilde{E} = \tilde{E}_{transl} + \tilde{E}_{rot} + \tilde{E}_{vibr.}$ und Q = Warmeenergie betrachtet werden. Für eine Diskussion darüber, daß dies für chemische Kinetik ungeeignet ist verweisen wir auf Light [C-17] . Wegen der zentralen Rolle des Begriffs des Schwellenzustands im allgemeinen biologischen Evolution, siehe Denbigh et al [A-11] haben wir eine neutrale Präzisierung gesucht. Es wird den Rahmen dieser Arbeit sprengen, den Nachweis hier auszuführen, daß bei Konservierung von Schwellenzuständen ('Conservation Thresholds'), die Wignersche Vorstellung der allgemeineren neutralen Präzisierung gleichkommt; (dies ist einer Aufarbeitung von Mbaeyi [C-19] vorbehalten). Für weitere Literaturverweise, verweisen wir auf die Angaben unter Sektion C des Literaturverzeichnisses. Für die anderen Probleme, z.B. Raumeffekte, die in diesem Abschnitt verschiedenlich angesprocehn wurden, verweisen auf die entsprechenden Sektionen des Literaturverzeichnisses.

2.2.2: DIFFUSIONS- UND RELAXATIONSKOEFFIZIENTEN ALS (KONTROLL-) PARAMETER VON EVOLUTIONSVORGÄNGEN

Die hiessige Aufgabenstellung (Frage F2, §1.1) ist auch ein Stück Transportproblem, bei dem den Transportkoeffizienten eine gewichtige Rolle als Einflußfaktoren zufallen. Diese sind vor allem Diffusions- und Relaxationskoeffizienten; (siehe unten für eine Beschreibung bzw. Definition dieser Koeffizienten, erst die Diffusions-, und dann die Relaxationskoeffizienten). Zwar genügt es für die hier gestellte Aufgabe, nur diese beiden Transportkoeffiziente zu betrachten. Allerdings ist die Berücksichtigung anderer Transportkoeffizienten notwendig für den weiteren Ausbau der Theorie (zum Beispiel für Ultrastrukturenprobleme - 'hyperfine structures' - in Halbleitern); diese sind u.a. Mobilitätskoeffizienten (Hesse [A-29]), Porositätskoeffizienten, z.B dielektrische Koeffizienten bei der Ausbreitung von elektrischen Feldern. Diese andere Koeffizienten lassen sich allerdings als Funktionen der Diffusions- und and inneren Koeffizienten definieren.

In den nichtlinearen DGLen, die für e, e_i, e_{ij}, ρ ρ_i, ρ_{ij} abgeleitet sind, werden die Transportkoeffizienten als konzentrations- bzw dichteabhägig definiert. Sie, samt ihrer Vorzüge, werden erst eingeführt; es folgen dann Erläuterungen, die Annahmen untermauern bzw. rechtfertigen.

ZU DIFFUSIONSKOEFFIZIENTEN:

Es wird eingenommen, daß ein im $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (mit Rand $\partial\Omega$) enthaltenen Prozeß Gradientengefälle bzgl. der Materie und/oder Energiedichten der Umgebung gegenüber (siehe Abb. 2.15) besitzt.

DEFINITION 2.21: *Als (gleichgewichtigende) Diffusion wird der Vorgang genannt, wo durch die Austausche zwischen θ und θ' (Abb. 2.15) durch den Rand $\partial\Omega$ den Ausgleich von θ & θ' (d.h. die Herstellung uniformiertes Zustands zwischen dem Prozeß in Ω und seiner Umgebung in $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$) als Ergebnis haben.*

Die Umkehrung von Definition 2.21 führt zu Aggregation (Materie- und/oder Energieanhäufung) und wird NICHT-GLEICHGEWICHTIGENDE Diffusion genannt; (dem Laserphänomen, §2.4 unten, liegt eine instabile Aggregation zugrunde).

Den in Definition 2.21 genannten Austauschen liegen die sogenannten 'Diffusionsströme' zugrunde; sie werden (ausgehend von Definition 2.21) als das Vielfache der Materie- bzw. Energiegradienten (versehen mit negativen Vorzeichnen als Verlustsymbolisierung) definiert. *Die Vielfachheit, die dem Gradientensymbol ($\nabla \cdot$ ------) vorangestellt wird, wird der Diffusionskoeffizient genannt.*

Für die nicht-gleichgewichtigende Diffusion behält man die Definition der Diffusionsströme, gekoppelt mit Erweiterungen an die Diffusionskoeffizienten:

a) Die Diffusionskoeffizienten werden in Formen von Tensoren eingeführt, siehe Adkins [D-1], Shewmon [D-50] Jost [D-33] Hirschfelder [N-26], und auch de Groote und Mazur [A-14]

b) Ein alternativer Weg: Der Diffusionskoeffizient wird quantisiert (der Quantisierung des Prozesses in Ω entsprechend), so daß eine hierarchisch geordnete Menge von Diffusionskoeffizienten gegeben wird. Die Probleme der gleichgewichtigende und nicht-gleichgewichtigende Diffusion wird dann einheitlich angegangen, durch Ableitung von Bedingungen für zero Diffusionsströme, siehe Mbaeyi [C-19].

Ausgangspunkt in beiden Fällen ist die Dichteabhägigkeit der Koeffizienten, siehe unten für empirisch begründete Untermaurungen.

ZU RELAXATIONSKOEFFIZIENTEN:

Es sei angenommen, daß das Gradientengefälle (z.B bezüglich der Materie) zwischen einem Prozeß in Ω und seiner Umgebung $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ durch eine äussere Einwirkung entstanden ist.

Es seien $\hat{c}$, $\hat{c}'$ die Materiedichten in Ω bzw. $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ als Folge dieser Störung, und c_e , c'_e die Gleichgewichtsdichten in Ω bzw. $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ (mit $\hat{c}_e = \hat{c}'_e$ als Sonderfall). Ferner seien T , T' ($< +\infty$) die durchschnittlichen Zeiten dafür daß nach Wegnahme der Störung $\hat{c} = c_e$ bzw. $\hat{c}' = c'_e$ werden.

Das Tempo, mit dem die Gleichgewichtsdichte in Ω angestrebt wird, wird gewöhnlich als

$$\frac{d\hat{c}}{dt} = -\frac{\hat{c} - c_e}{T} \tag{2.21}$$

definiert, siehe Jost [D-33] bis [D-36] , Hiromi [D-29] , Strehlow et al [D-52] , Sundheim [D-53] , Thusius [D-54]

Diese DGL 1. Ordnung hat die Lösung

$$\hat{c} = c_e + \hat{k}\, e^{-\frac{1}{T}t} \tag{2.22}$$

wobei $\hat{k}$ eine beliebige Konstante ist, siehe Ince [F-10] .

DEFINITION 2.22: *Das Streben eines Prozesses von einem gestörten Zustand zurück zum Gleichgewichtszustand wird RELAXATIONSERSCHEINUNG genannt.*

DEFINITION 2.23: *Die Zahl T wird Relaxationszeit genannt, und ihre Inverse, $\eta_o = -(1/T)$ wird symbolisch Relaxationsgeschwindigkeit genannt.*

Da

$$\begin{aligned} \eta_o &\longrightarrow -\infty \quad \text{für } T \longrightarrow 0 \\ \eta_o &\longrightarrow 0 \quad \text{" } T \longrightarrow +\infty \end{aligned} \tag{2.23}$$

ist η_o ein Maß für die Abnahme von $\exp(-\frac{1}{T}t)$ für alle $t \in \mathbb{R}_t^+$ (bzw. für die Zunahme für alle $t \in \mathbb{R}_t^-$).

ANMERKUNG 2.24 Für alle $T < +\infty$ zeigt die Identität (2.22) daß $\hat{c} \longrightarrow c_e$ nicht immer ganz genau erreicht wird, und in diesem Zusammenhang wird an die steuerungstheoretische Ergebnisse (siehe Mbaeyi [A-39]), die zum Beginn von §2.2 angesprochen wurden.

ANMERKUNG 2.25: Hirschfelder et al , siehe [N-26] , Seite 21 und 503, definieren Relaxationszeit als die charakteristische Zeit

die für Energietransfer zwischen Translationsbewegung und den inneren Freiheitsgraden eines Prozesses notwendig ist. Verstanden als die Verteilung von Translationsenergie an die inneren Freiheitsgrade zur Herstellung eines Gleichgewichts, diese Beschreibung und die obigen Definitionen sind sinngemäß ähnlich.

Stellt man dieselben Oberlegungen bzgl der Umgebung $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ so ergibt sich aus der dualen Relaxationszeit T', eine duale Relaxationsgeschwindigkeit η_0', die, wegen $\partial\Omega$, Einfluß auf η_0 hat. So daß die Relaxationserscheinung komplizierter abläuft, in dem Sinne, daß η_0 u.a. von η_0' abhängt, und umgekehrt. Zieht man noch mikroskopische Einflüsse (z.B. verschiedene Rotationsachse molekularer Aggregate) hinzu, so ergeben sich die Notwendigkeit für verschiedene Relaxationszeiten im selben Prozess; (über diesen Weg werden auch Beziehungen zu anderen Transportkoeffizienten - Viskosität, Mobilitäten - hergestellt, siehe z. B. de Groote und Mazur [A-14], Hirschfelder et al [N-26]).

Dieser Verzahmung wird, wie folgt, Rechnung getragen: Die Relaxationszeiten T und T' werden als Funktionen $\varphi(\hat{C}, \hat{P}^\bullet)$ bzw. $\varphi'(\hat{C}' \hat{P}')$ definiert, wobei $\hat{P}$, $\hat{P}'$ sich auf andere innere Parameter beziehen. *Diese Funktionen werden Relaxationskoeffizienten (als Verallgemeinerung des Begriffs der Relaxationszeiten) genannt.* (Die Abhängigkeit von Dichten ist eine Obernahme aus empirisch gestutzten Fakten, wie die Zitate unten zeigen werden). Formel haben wir:

DEFINITION 2.26: *Der Relaxationskoeffizient $\varphi(\hat{C}, \hat{P})$ definiert die variablen Relaxationszeiten, die einem Prozess als Folge der Variabilität seiner inneren Parameter und der Interaktion mit der Umgebung zugeordnet werden.*

ANMERKUNG 2.27: Richtiger wäre $\varphi(\hat{C}\ \hat{C}', \hat{P}, \hat{P}')$; aber durch die hierarchische Anordnung der Quantisierung wird dies gesucht in Form von Polynomen in $\varphi(\hat{C}, \hat{P})$ und $\varphi'(\hat{C}', \hat{P}')$.

Setzt man $\varphi(\hat{C}, \hat{P})$ statt T in (2.21) ein, so ergibt sich

$$\frac{d\tilde{C}}{dt} = \frac{\tilde{C}}{\varphi(\tilde{C}, \hat{P})} \qquad \tilde{C} = \hat{C} - \hat{C}_e \tag{2.24}$$

deren Lösung eine Integralgleichung (IGL) ergibt. Eine 1. Vereinfachung, die Integration als DGL. 1. Ordnung mit Hilfe von Methoden der Variation von Parametern zulässt, erreicht man durch analytische Forderungen an $\varphi(C, P)$, wie unten gleich geschehen wird.

Es seien $\sigma(e)$, $D(\rho)$, $\sigma_i(e_i)$, $D_i(\rho_i)$, $\sigma_{ij}(e_{ij})$ und $D_{ij}(\rho_{ij})$ die Diffusionskoeffizienten für den Transport der Hierarchieelemente e, ρ, e_i, ρ_i, e_{ij}, ρ_{ij}.
Ferener seien $\tau(e)$, $\eta(\rho)$, $\tau_i(e_i)$, $\eta_i(\rho_i)$, $\tau_{ij}(e_{ij})$ und $\eta_{ij}(\rho_{ij})$ die entsprechenden Relaxationskoeffizienten.
Diesen Koeffizienten werden folgende Eigenschaften zugeordnet:

APTC-1: *Alle Koeffizienten sind differenzierbar bezüglich der entsprechenden Variablen.*

(Differenzierbarkeit einer Funktion hat ihrer Stetigkeit zur Folge).

APTC-2: *All Koeffizienten sind lokal analytisch, insbesondere in Umgebungen von stationären Zuständen.*

APTC-3: *Die Koeffizienten werden Konstante an den Stellen, die stationäre Zustände sind.*

APTC-4: $D(\rho) = 0$ *für* $\rho = 0$ & $D(\rho) \longrightarrow 0$ *für* $\rho \longrightarrow +\infty$
$\sigma(e) = 0$ *für* $e = 0$, *aber* $\sigma(e) \longrightarrow K < +\infty$ *für* ~~$e \longrightarrow +\infty$~~
Ansonsten besitzen $D(\rho)$ *und* $\sigma(e)$ *keine Nullstellen. Aber* $(\partial D / \partial \rho) = (\partial \sigma / \partial e) = 0$ *existieren an mehreren Stellen - Umgebungen von stationären Zuständen.*

APTC-5: $\tau(e)$ *und* $\eta(\rho)$ *besitzen mehrere Nullstellen und Extrema, und werden die Formen in Abb. 2.18 und Abb. 2.19 zugeordnet:*

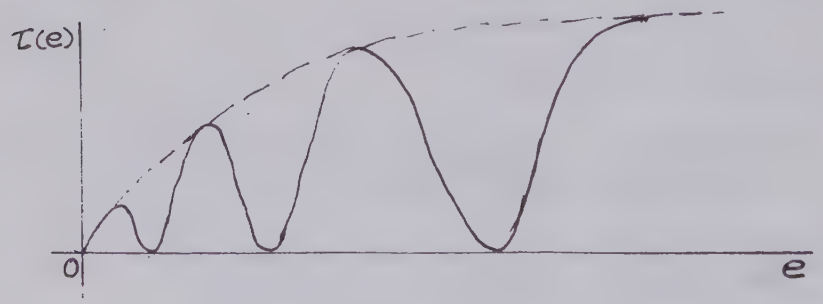


Abb. 2.18

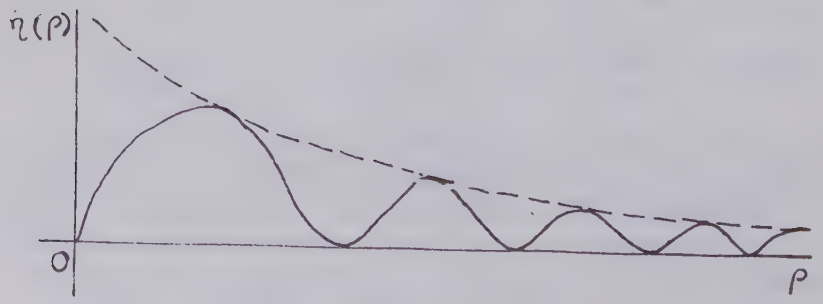


Abb. 2.19

Mit anderen Wörten: $\tau(e) = 0 \iff e = 0$,
$\eta(\rho) = 0 \iff \rho = 0$; $\tau(e) \longrightarrow K' < +\infty$
$e \longrightarrow +\infty$ & $\eta(\rho) \longrightarrow 0$, $\rho \longrightarrow +\infty$.

APTC-6: $D(\rho)\,\rho^{-1} = (\Sigma D_i(\rho_i))(\Sigma \rho_i)^{-1} = (\Sigma\Sigma D_{ij}(\rho_{ij}))(\Sigma\Sigma \rho_{ij})^{-1} = 1$
Ähnliche Relationen gelten für e , e_i , e_{ij} .

DIe obigen Eigenschaften sind stellvertretend mit $D(\rho)$, $\sigma(e)$ $\eta(\rho)$, $\tau(e)$ definiert; analoge Eigenschaften gelten für die Koeffizientenhierarchie, wie es in APTC-6 zum Ausdruck kommt. (APTC $\equiv$ 'Analytic Properties of Transport Coefficients').

Die Eigenschaften, teils Erweiterung klassicher Konzepte und teils Ableitung aus anderen Charakteristika haben folgende Bedeutungen:

a) APTC-1 ist erforderlich, damit die Transportkoeffizienten kontinuerlich als Einflußparameter zur Konditionierung eingesetzt werden können; APTC-2 gewährleistet die analytische Darstellungen, während APTC-3 die übliche Annahme der klassischen Diffusionskonzepte (gültig in Umgebungen stationärer Zustände) sicherstellt.
Mit anderen Wörten: Die ersten 3 Forderungen sind notwendige Erweiterungen an Transportkoeffizienten, um der hiessigen Aufgabenstellung gerecht zu werden.

b) APTC-4 entspringt der Phänomenologie der Materie und Energie: Die unterschiedlichen Grenzwerte für $\rho \longrightarrow +\infty$ und $e \longrightarrow +\infty$ lassen sich am einfachsten aus der Phänomenologie des Warmetransports durch Festkörper erklären. Während es (bei geeigneten Temperaturbereichen) keinen Materiefluß gibt, so daß $D(\rho) \simeq 0$, ist der Energietransport (Warmetransport, Temperaturfluß) dominant. Die Obergänge zwischen stationären Zuständen unter Heranziehung von Transportkoeffizienten, die an den Stellen der stationären Zustände der Forderung $(\partial D/\partial \rho) = (\partial \sigma/\partial e) = 0$ usw genügen, sind lediglich eine analytische Untermauerung von APTC-3 - nämlich die Existenz von Extremalpunkten für die Transportkoeffizienten.
Wie bereits in §2.2.1 festgestellt wurde ist das gegenseitiges Ablösen von SW- und TW-Wellen charakteristisch für Obergänge zwischen SS (Steady States). Dies bedeutet allerdings, daß $|\tau(e)|$, $|\eta(\rho)|$ usw zwischen 0 und gewissen Mengen von positiven Zahlen oszillieren. Die gewählten Formen in Abb. 2.18 und Abb. 2.19 gehen auf die Feststellung zurück: e , ρ nicht ein absolutes Minimum oder Maximum gleichzeitig, siehe

Mbaeyi [C-19] . Phänomenologisch macht sich diese Feststellung durch folgende Eigenschaft bemerkbar in manchen empirischen Beobachtungen: zähes und sehr störanfälliges Verhalten bei sehr niedrigen oder sehr höhen Energie- bzw. Populationsdichten; (auf eine analytische Behandlung wird hier verzichtet, da sonst der Rahmen dieser Arbeit geprengt wird).
APTC-6 ist die einzige aufgestellte Forderung - eine Notwendigkeit für Konsistenz in hierarchischen Modell.

Anhand von $D(\rho)$ wollen wir die Vorzüge dieser Formen der Transportkoeffizienten verdeutlichen:
Ist ρ^* ein gewählter Punkt (vorzugsweise ein SS), dann, in einer geeigneten Umgebung, gilt nach APTC-2

$$D(\rho) = d^* + \frac{\partial D}{\partial \rho}|\rho - \rho^*| + \frac{\partial^2 D}{\partial \rho^2}|\rho - \rho^*|^2 + \cdots \qquad (2.25)$$

($d^* \equiv$ constant). Betrachten wir einen Punkt (x^*, t^*) des Raumes $\Omega \times \mathbb{R}_t \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_t$, $1 \leq d \leq 3$, in dessen Umgebung ρ auch analytisch ist; dann gilt:

$$\rho = \rho^* + \sum_{i'=1}^{d+1} \frac{\partial \rho}{\partial x_{i'}}|x_{i'} - x^*_{i'}| + \sum_{i''=1}^{d+1}\sum_{i'=1}^{d+1} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_{i'} x_{i''}}|x_{i'} - x^*_{i'}|\,|x_{i''} - x^*_{i''}| + \cdots \qquad (2.26)$$

Einsetzen von $|\rho - \rho^*|^r$, $r = 1,2,3,\ldots\ldots$ aus (2.26) in (2.25) ergibt sofort, daß $D(\rho)$ ortsabhängig ist. Für $r \geq 2$ kommen noch die Beiträge von $(\nabla\rho)^r$, $r \geq 2$, $(\nabla^r \rho)$ hinzu. Mit anderen Wörten: $D(\rho)$ ist der Annahme von Diffusionskoeffizienten in der Form $D(x, \rho, \nabla\rho)$ äquivalent, die häufig in der Literatur (siehe Adkins [D-1] , Bird et al [D-10] , Boon [D-11] , Czerlinski [D-18] , Fujita [D-22] und [D-23], Jost [D-33] bis [D-36] , Shewmon [D-50] , Strehlow et al [D-52] Sundheim [D-53]) gemacht wird.
Bekanntlich ist $\rho = N V^{-1}$ (siehe (2.6) oben); daraus ergibt sich:

(2.27) $D(p) \triangleq D(x, N, V, \nabla N, \nabla V)$

Mit anderen Wörten: Transportkoeffizienten sind Raum- und Populationseinschränkungen unterworfen.
Für empirische Nachweise der Raumeffekte, insbesondere bezüglich der chemischen Kinetik, wir dauf entsprechende Literaur in Sektion D des Literaturverzeichnisses dieser Arbeit verwiesen.

ANMERKUNG 2.28: In der Onsagerschen Theorie für Diffusion in Multikomponentensystemen werden Transportkoeffizienten nur bezüglich bestimmter Volumbedingungen definiert, siehe de Groote und Mazur [A-14] . In diesem Zusammenhang und bezogen auf die chemische Kinetik notierte Battino [D-7] :

> 'Volume changes on mixing have been of interest for several reasons: (1) to test theories of solution; (2) to convert thermodynamic properties determined at constant pressure to the condition of mixing at constant volume; (3) to dedetermine the second virial coefficient; and (4) for the practical purpose of determining composition from density measurements.....'

Die Bildung einer Hierarchie von Transportkoeffizienten ist die Folge des angewandten hierarchischen Modells. Allerdings hat dies nützliche Konsequenzen: Häufig betrahtet man in der chemischen Kinetik, z.B. Kinetik der Energieumverteilung in chemischer Lösung, u.a. Rotations- und Schwingungsdiffusion - Diffusion von Rotations- und Schwingungszuständen, siehe Porter [A-53] , Moore [E-41] Moore [N-22] , Hirschfelder et al [N-26] Da $\sigma(e) = \sigma(e^{o} + e^{(t)} + \alpha e^{(t)} e' \rho' V' S^{-1} S)$, siehe (2.10) und (2.11) oben, ermöglicht die Hierarchie der Diffusionskoeffizienten eine gezielte lokalisierte Steuerung der Transportbeiträge einzelner Zustandstypen; in diesem Zusammenhang, siehe auch den Begriff der 'Sältatorischen Diffusion'.
Die Veränderlichkeit von Transportkoeffizienten ist eine längst bekannte empirische Tatsache; ihr wird verschiedenlich Rechnung getrangen, u.a. durch die Formulierung als orts- bzw. konzentrationsabhängig oder beides usw. Hier wird die Konzentrationsabhängigkeit gewählt, die, wie es sich oben zeigt, ergänzende Überlegungen schon enthält. Hierzu existieren eine zahlreiche Literatur; eine Auswahl ist in der Sektion D des Literaturverzeichnisses enthalten, und vor allem wird auf die zahlreiche, weiterführende Hinweise in Jost et al [D-33] hingewiesen.

Die klassischen Transportkoeffizienten, als Konstante designiert, sind ein Ergebniss des Fickschen Gesetzes und der Theorie der Brownschen Bewegung. Die meisten realen Fälle weichen von diesen Rahmen ab und machen veränderliche Koeffizienten notwendig. Zur Gültigkeit der Rahmen für die Brownsche Bewegung bemerkte Adkins [D-1] :

> 'In a re-examination of the problem for a mixture of fluids, Truesdell & Toupin (....) have pointed out that in this case, since the diffusion process involves the relative motion of the constituents of the mixture, a transfer of momemtum between components is involved. They suggest an approach to the formulation of constitutive equations for diffusion based on this idea. In many practical cases the omission of momentum terms from the equations describing a diffusion process is unimportant since velocities at any point of the medium are small. This is usually true, for example, in the case of heterogeneous mixture of fluids which is at rest apart from the motion arising from diffusion for the case of gases and liquids diffusing into solids, and of solids diffusing into each other. When a mixture of fluids is in motion, we have, in effect, a combination of two different kinds of problem. The first is that of simple fluid flow in which all constituents of the mixture are moving with the same velocity at any given point and no diffusion effects are present. The second is that of simple diffusion, in which the constituents of the mixture are moving relative to each other, but in such a manner that the mean velocity of the mixture at each point is zero. When both kinds of flow are present, momentum effects may become important and a theory is required which takes into account not only such effects but also the mechanical properties of the individual constituents. Both influences may evidently affect the resultant process in a linear or a nonlinear manner.....'

Zur Gültigkeitsbereich des Fickschen Gesetzes bemerkt Shewmon, [D-50] , Seite 23 (über 'Stress-assisted Diffusion'):

> 'General Effect of Potential Gradient. As the last problem to be solved for constant D, we consider the effect of an elastic stress gradient on diffusion. This is representative of the problems in which Fick's first law is no longer the flux equation. A potential gradient tends to produce a flux of atoms, and this flux must be added to that produced by the concentration gradient to arrive at the equation for the total flux.....'

Dies führt zu Betrachtung von Diffusion unter Einfluß von veränderlichen Diffusionskoeffizienten, siehe Shewmon [D-50] S. 28-29.

In ähnlicher Weise, aber bezogen speziell auf die chemische Kinetik bemerkte Lamm [D-42] S. 291 - 292:

> '..... Diffusion processes are generally described in terms of diffusion coefficients, volume concentrations and

thermodynamic potential or activity factors. Partial volume factors and friction coefficients associated with the components of the diffusing mixture are also essential in the description. A feature of the macro-dynamical theory is that it covers any region of concentration. Especially simple equations are connected with the *differential* diffusion process (diffusion with small concentration differences), for which the different coefficients or factors mentioned above are practically constant. 'The differential diffusion coefficients are characteristic of any mechanically normal and chemically stable equilibrium mixture; they present properties of state. This reminds of the neccessity in (non-dilute) chemical kinetics of assuming a small change, so that the 'medium effects' will not turn the rate constants into variables of time. This fact regarding the elementary description of a chemical reaction rate is not always explicitly stated in the texts. The reason may be that a chemical change has often been conviniently measured only in a rather limited concentration range of the reactants and that most experiments have been confined to dilute solutions. If this simplification were not introduced, the kinematics in question would, for instance, contain partial volumes.'

Das heisst: Das Ficksche Gesetz gilt dann, wann keine große energetische Ausbeute der chemischen Kinetik einhergeht. Daher ist das Ficksche Gestz keine geeignete Basis für Transportrobleme, die mit Laserphänomenen zusammenhängen. Sogar für eine beliebige normale Lösung (nicht schwache, nicht starke Lösungen) führt Lamm (siehe [D-42]) andere Koeffizienten ein, wodurch die Onsagerschen phänomenologischen Koeffizienten meßbar werden; er erreicht die Konzentrationsabhängigkeit der Diffusionskoeffizienten, und leitet daraus die genaue Bedingung für die Gültigkeitsbereiche des Fickschen Gesetzes ab, siehe Lamm [D-42] .

Im Sinne dieser Diskussion werden wir statt der Gleichung (1.10), die Gleichung

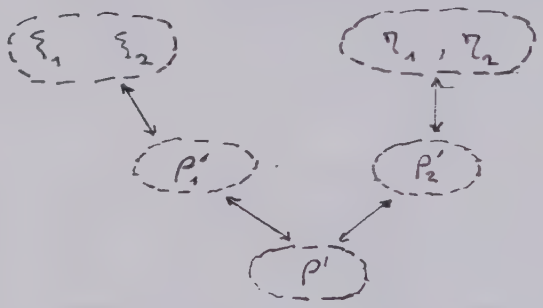
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla(D(c)\nabla c) + f(c, \mu) \tag{2.28}$$

betrachten; weitere Ergänzungen folgen in §2.3.
Die Gleichung (2.28) gilt für die unterste Ebene des hier eingeführten hierarchischen Modells. Die Rechtfertigung für die veränderlichen Diffusionskoeffizienten muß nun auf die hierarchische Gliederung ausgedehnt werden. Ein Leigedanke dabei ist laut Adkins [D-1] :

'.....The assumption, usual in the treatment of mixtures, is made that each point within the medium can be occu-

pied simultaneously by the several constituents. On a macroscopic scale, this assumption probably yields a good approximation to the actual situation which exists; in any small but finite element of volume we might expect to find some or all constituents present in a given proportion, this proportion varying continuously throughout the medium. For each constituent we assume that kinematic and mechanical quantities such as velocity, acceleration, density, stress and body force per unit mass may be defined, and that with the aid of these, equations of motion and conservation of mass may be written down. For a mixture of n components, this procedure yields a system of 4n partial differential equations.'

Betrachten wir die Elemente des Seeligschen Modells $(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2) \equiv C$ in den Gleichungen (1.10) und (2.28). Wie schon in §2.1 festgestellt wurde, liefern sie die Hierarchie:



Der Diffusionsstrom $J_{\rho'}$ von ρ' ist die gesamte Diffusionsbewegungen im dem Kästchen in Abb. 1.1a; er hat die Komponente $J_{\rho_1'}$ und $J_{\rho_2'}$, für die gilt:

$$J_{\rho'} = J_{\rho_1'} + J_{\rho_2'} \tag{2.29}$$

Ist D' der Diffusionskoeffizient für ρ', D_1', D_2' die Diffusionskoeffizienten für ρ_1' bzw. ρ_2', dann folgt aus

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = \nabla J_{\rho'} = \frac{\partial \rho_1'}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2'}{\partial t} = \nabla J_{\rho_1'} + \nabla J_{\rho_2'} \tag{2.30}$$

daß

$$D'\nabla\rho' = D_1'\nabla\rho_1' + D_2'\nabla\rho_2' \tag{2.31}$$

Ist $\rho' = g(\rho_1', \rho_2')$, dann folgt

(2.32) $$D' = \frac{1}{2}\left[D_1'\left(\frac{\partial g}{\partial \rho_1'}\right)^{-1} + D_2\left(\frac{\partial g}{\partial \rho_2'}\right)^{-1}\right]$$

Auf ähnliche Weise erhalten wir:

(2.33) $$D_1' = \frac{1}{2}\left[D_{11}'\left(\frac{\partial g_1}{\partial \xi_1}\right)^{-1} + D_{12}'\left(\frac{\partial g_1}{\partial \xi_2}\right)^{-1}\right]$$

$$D_2' = \frac{1}{2}\left[D_{21}'\left(\frac{\partial g_2}{\partial \eta_1}\right)^{-1} + D_{22}'\left(\frac{\partial g_2}{\partial \eta_2}\right)^{-1}\right]$$

wobei $\rho_1' = g_1(\xi_1, \xi_2)$, $\rho_2' = g_2(\eta_1, \eta_2)$ und D_{11}', D_{12}', D_{21}' , D_{22}' sind die entsprechenden Diffusionskoeffizieneten. Im hierarchischen Modell der Seeligschen Aufgabe gilt: $g_1 = \xi_1 + \xi_2$, $g_2 = \eta_1 + \eta_2$ und $g = \rho_1' + \rho_2'$. Nach den vorausgegangenen Ausführungen haben wir: $D_{11}' = D_{11}'(\xi_1)$, $D_{12}' = D_{12}'(\xi_2)$ usw. Zusammengenommen führen dies zu der Annahme: $D_1'(\rho_1')$, $D_2'(\rho_2')$, $D'(\rho')$. Mit anderen Wörten: Die Konzentrationsabhängigkeit von Transportkoeffizienten bleiben im hierarchischen Modell erhalten.
Ohne die hierarchische Gliederung musste man mit Transportkoeffizieneten operieren, die von allen Konzentrationen gleichzeitig abhängen, um die durchgreifenden Interkationseffekte berücksichtigen zu können. Es entstehen Ausdrücke für Transportkoeffizienten, die numerische Betrachtungen betrachtlich erschweren.

Neben den Diffusionskoeffizienten, sind die Relaxationskoeffizienten die nächst wichtigste Transportfaktoren, siehe die vorausgegangenen Erläuterungen zum Beginn dieses Abschnitts. Für die gewählten Formen in der Definition von 'Analytic Probperties of Transport Coefficients', APTC-1 bis APTC-6, wollen kurze Rechfertigung anführen. Im allgemeinen wird die Relaxationszeit, für die der Relaxationskoeffizient eine Verallgemeinerung ist, als Funktionen der Aktivitätskoeffizienten (chemischer Kinetik) definiert, und ist somit konzentrationsabhängig, siehe Hiromi [D-29] , Jost [D-33] bis [D-35] , Strehlow et al [D-52] . Diese Veränderbarkeit der Relaxationszeit ist besonders nützlich für zeitabhängige Abläufe, wie etwa die Übergänge zwischen stationären Zuständen; hierzu Hiromi [D-29] . Kapitel 4:

> 'In the study of the transient phase of enzyme reactions, experimental data obtained by fast reaction techniques are

in most cases represented by a single exponential curve for the first order reaction, or by the superposition of more than one exponential curve. Analysis of these curves permits the permits the apprent first oder rate constant k_{app} or the relaxation time τ, which is the reciprocal of k_{app}, for each curve to be calculated. Generally, these k_{app} or $1/\tau$ are a function of the reactant concentrations.

'The next step is thus to investigate the apprent rate constants (or relaxation times) as a function of the concentrations of reactants, including the enzyme und substrate, in order to elucidate the reaction mechanism in terms of its elementary steps, and to determine the rate constants of these steps. The procedure adopted is essentially similar to that employed in steady state kinetics, in which the initial rate, instead of the rate constant, is used as an index of the rate of reaction.

'The difference between these two kinetic methods is that the former (i.e. steady state kinetics) is based on the rate of conversion of substrates into products, disregarding the changes occuring in the enzyme molekule, whereas the latter (i.e. transient kinetics) aims particularly to observe the rate of elementary reaction by monitoring the change occuring in the enzyme itself. The convineint index for the rate reaction is thus the inittial rate in the former case, and the apparrent first order rate constant or relaxation time in the latter. Moereover, there is some difference in the derivation of the rate equations between the two methods, since the enzyme is regarded as a *catalyst* in steady-state kinetics, but is treated as a *reactant* directly involved in the elementary steps in transient kinectics.'

Für die Hierarchie der Relaxationskoeffizienten, wie für die Diffusionskoeffizienten, verweisen wir auf Mbaeyi [C-19] ; sie ist wichwichtig für spätere Betrachtungen über Fluktuationen (stochastisches Verhalten) und Rauschen in solchen Systemen (besonders unter unter Einflussen von schnellen Impulsfolgen).

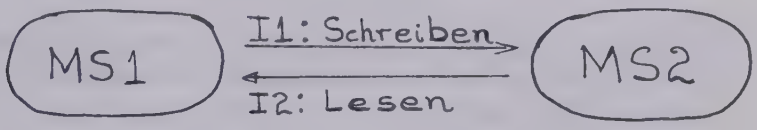
Die gewünschten expliziten Formen von $D(\rho)$, $\sigma(e)$, $\tau(e)$, $\eta(\rho)$ werden in Kapitel 5, §5.2 angegeben; es sind spezielle analytische Formen, die für die hier gestellte Aufgabe geeignet sind. Detailiertere, allgemeinere Formen für einen beliebigen Transportprozess wird in der geplanten Aufarbeitung von Mbaeyi [C-19] eingehend diskutiert.

2.2.3 GEDÄCHTNISKONZEPTE UND - TYPEN:

Eine eingehende Diskussion über Gedächtniskonzepte bzw. -Typen übersteigt den Rahemn dieser Arbeit. Die hier gegebene Erörterung wird sich daher auf die wenigen Punkte beschränken, die unbedingt erforderlich sind; für die verschiedenste Charakterisierung von Gedächtnis verweisen auf Herriot [A-28] .

Gedächtnis ist die Bewahrung von Information (Definition 1.2). Diese Bewahrung kann von kurzer Dauer sein, dann spricht man von Kurzzeitgedächtnis (STM - 'Short Term Memory'), oder bleibend - Langzeitgedächtnis (LTM - 'Long Term Memory') genannt. Ein Speziellfall des LTM ist von Interesse in dieser Arbeit - die Erzeugung von LTM durch kontinuerliche Erneuerung von STM.

In Anlehnung an die Computerwissenschaft sollen einige Aspekte des Gedächtnisses erörtert werden; demnach sind zwei stationäre Zustände erforderlich, und parallel dazu zwei Klassen von Eingaben. Bezeichne mit MS1 , MS2 die 2 stationäre Zustände, die für Gedächtnis als geeignet angenommen werden, und dazu die Eingabeklassen I1, I2.
Das Schreiben, d.h. die Schaffung von Gedächtnis besteht in der Überführung MS1 $\longrightarrow$ MS2 mit Hilfe der Eingabeklasse I1; ihre Abrufung (Lesen genannt) sntspricht MS2 $\longrightarrow$ MS1 mit Hilfe von I2. Zusammen genommen haben wir dann:



Ist MS1 stabil nach dem Lesen, dann heisst das geprägte Gedächtnis gelöscht. Wird MS2 gleich nach dem Lesen erneuert, dann kann der Zustand MS2 beliebig lang aufrechterhalten werden; (dies ergibt dann ein LTM). Die Erneuerung von MS2 nach einem Lesen bedeutet die Existenz eine automatische Rückkoppelung ('Feedback') MS1 $\longrightarrow$ MS2 ; (im allgemeinen biologischen Gedächtnis ist dieses Feedback ein autokatalytischer Prozess). Bleibt MS2 nur für eine kurze Zeit stabil, gefolgt dann von langsamem Zerfall, dann haben wir nur den Fall von STM. Sorgt man allerdings durch Feedback dafür, daß der Zerfall aufgehalten wird, so kann auf dieser Weise ein LTM eingeprägt werden. In der Computerwissenschaft, wo häufig Kondensatoren und Batterien, und deren Aufladung eine wichtige Rolle in der Informationspeicherung spielen, sind dies die Mechanismen der Langzeitspeicherung von Information, siehe Motsch [E-43]
Ferner wollen wir zwei Gedächtnistypen unterscheiden:

DEFINITION 2.29: *Existieren spezifischen I1 und I2 für die Operationen des Schreibens und Lesens, und sind MS1 und MS2 1-Punkt-Menge, dann heißt das Gedächtnis deterministisch.*

DEFINITION 2.30: *Das Gedächtnis heißt stochastisch, wenn MS1 und MS2 nicht 1-Punkt-Menge sind.*

DEFINITION 2.31: *Ein System (mit Gedächtnisfähigkeit) heißt Konditionierbar, wenn sich sein stochastisches Gedächtnis in ein deterministisches überführen lässt, mit Hilfe äusserer Einwirkungen.*

Haäufig gibt es in molekularen Systemen Energieniveaus wie in Abb. 2.20

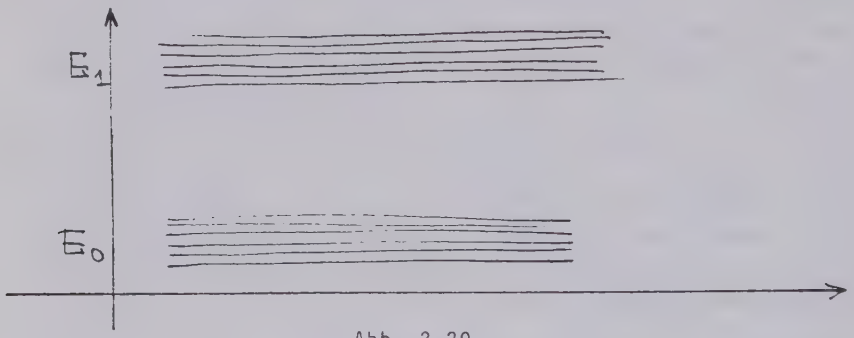


Abb. 2.20

Der Übergang von E_0 in E_1 kann von einem der äquivalenten Niveaus von E_0 ausgehen, und in einen der äquivalente Niveaus von E_1 enden. Konditionierbarkeit heißt nichts anderes als die Prägung eines Punkt-Punkt-Übergängs, entweder durch die scrittweise Verkleinerung der Mengen, die E_0 und E_1 dasrtellen, auf eine 1-Punkt-Menge jeweils, oder eine derartigen Präzisierung des Übergangs. daß er von einem spezifischen Punkt der Menge E_0 zu einem spezifischen Punkt der Menge E_1 erfolgt.
Zum Vergleich bietet sich Abb. 2.21 aus Lempicki et al [E-36] an; (Seite 73 gegenüber).
In diesem Zusammenhang verweisen wir auch auf Delcroix [C-6] und andere entsprechende Literatur der Quantenchemie.

2.2.4: GEDÄCHTNISOPERATIONEN: NRZ-MODUS UND DIFFUSIONSABHÄNGIGE GEDÄCHTNISPRÄGUNG

Hier sollen Aspekte von Gedächtnisoperationen (Definition 1.5) kurz erörtert werden - wie Gedächtnis geschaffen und abgerufen wird.

Die qualitative Theorie dynamischer Systeme a la Poincare [N-14], siehe auch Demidovich [F-6] , Malkin [F-16] , Nemytskii und Stepanov [F-22] , besagt, daß 2 stabile Zustände stets durch einen

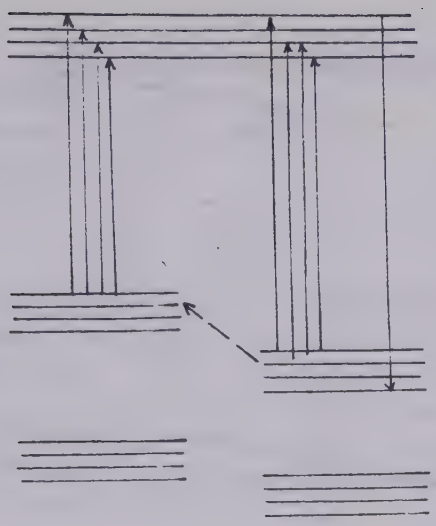


Abb. 2.21: Energieniveaus für organische Moleküle

instabilen getrennt sind. Daher müssen wir neben MS1 und MS2 (von §2.2.3) auch ein USS (instabilen stationären Zustand) betrachten. Der USS 'verhindert' die Verschmelzung ('Coalescence') von MS1 und MS2, d.h. sichert ihre eindeutige Existenz.

Gedächtnisoperationen werden dannach unterschieden, wie MS1, MS2 und USS aufrechterhalten werden. Sind sie ohne äussere Einwirkung zu erhalten, so spricht man von RZ ('Return to Zero')-Modus von Gedächtnisoperationen. Dies ist der Fall bei Gedächtniselementen aus permanenten Magneten, für die die quadratische Hysteresekurve, Abb. 2.22 (Seite 74) gilt, siehe Jacobowitz [E-28] , und Middeelhoek et al [E-39] für Einzelheiten.
(In Abb. 2.22, der Nullpunkt O ist der USS; nach der 1. Magnetisierung wird er nicht mehr angesteuert).
Das heisst: Im RZ-Modus kann Information gehalten werden ohne Energieaufwand.

Demgegenüber gibt es den NRZ ('Non-Return to Zero')-Modus - eine Informationsspeicherung, die Energeieaufwand abverlangt für die Bewahrung von geschriebener Information. Dies ist der Fall mit dem elektronischen Flip-Flop, Abb. 2.23 (aus Jacobowitz [E-28])

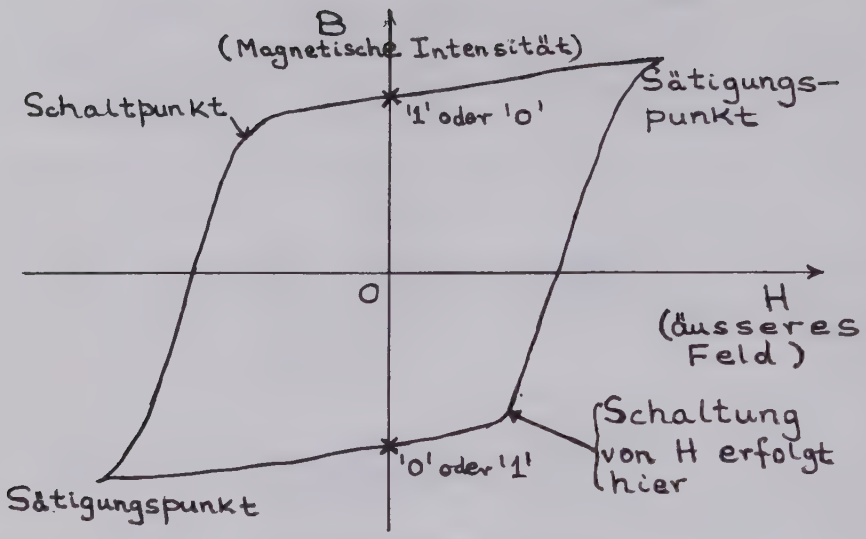


Abb. 2.22

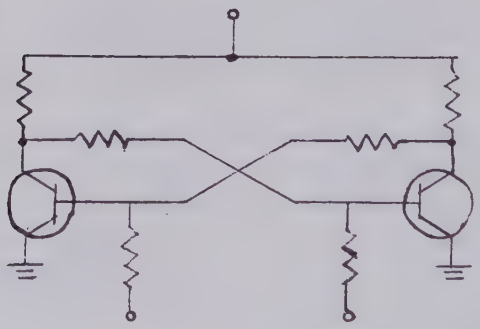


Abb. 2.23: Flip-Flop-Schaltung (bistabler Multivibrator)

Der Zustand der (p-n-p) Transistoren ('0' oder '1') wird mit Hilfe von entsprechender Energieaufwand aufrechterhalten, siehe Jacobowitz [E-28] , und auch Middeelhoek et al [E-39] ; diese entspricht den Spannungen, die für die ständige Aufrechterhaltung der obigen Flip-Flop-Schaltung notwendig sind.
Mit Hilfe dieser Schaltung lässt sich folgende logische Einheit erzeugen, Abb. 2.24:

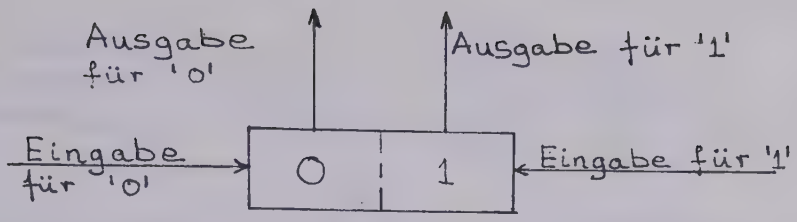


Abb. 2.24

Da das klassische Diffusionskonzept kein Mittel der Materieakkumulation (Ladungsakkumulation ist die Grundlage der Transistoroperationen) ist, siehe Copeland [C-5] sind zusätzliche Eigenschaften für diffusionsgetragene Gedächtnisvorgänge notwendig. Neben den veränderlichen Transportkoeffizienten, ist das NRZ-Modus auch unerläßlich für diffusionsgetrangene Akkumulation. Ein weiteres Hilfsmittel wird unten erörtert.

2.2.5: FLIP-FLOP ALS EIN GRUNDPRINZIP DER EVOLUTION

Für chemische Evolutionsprozesse ist das Turing-Modell, siehe Turing [A-67] , das Analog von (elektronischen) Flip-Flop-System. Ein Turing Modell wird allgemein durch Gleichungen von Typ (1.10) in chemischen Reaktions-Diffusions-Prozessen dargestellt. Durch Einsetzen von

$$C = \Psi'(\xi) \qquad \xi = \omega \cdot x - \nu t \tag{2.34}$$

($C \equiv (\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2)$ im Seeligschen Modell) erhält man aus (1.10) die abgeleiteten gewöhnlichen DGLen:

$$-\nu \frac{d\Psi'}{d\xi} = D(\Psi') \frac{d^2\Psi'}{d\xi^2} \omega^2 + f(\Psi', \mu) \tag{2.35}$$

oder in Vektorform (als System von DGLen 1. Ordnung):

$$\dot{\Psi}' = \tilde{A}(\nu, D(\Psi'), \omega)\Psi' + \tilde{F}'(\Psi', D(\Psi'), \omega, \mu)$$
$$\Psi' = (\Psi_1', \Psi_2')^T, \quad \tilde{F}' = [D(\Psi')\omega]^{-1}(0, f(\Psi', \mu))^T \tag{2.36}$$

$\tilde{A}$ ist eine 8 x 8 Matrix der Form

$$\left(\begin{array}{c|c} \tilde{A}_1 & \tilde{A}_2 \\ \hline \tilde{A}_3 & \tilde{A}_4 \end{array}\right) \tag{2.37}$$

A_2 und A_4 sind Diagonalmatrizen mit den Diagonalelementen 1 bzw. $-\nu[D(\psi')\omega^2]^{-1}$

$A_1 = A_3 = 0$

Eagl ob $F' \in \mathbb{R}^8$ lineare Glieder in ψ' enthält, oder nicht, die Matrix $\tilde{A}$ besitzt auf jeden Fall 4 verschindenden Eigenwerte, allerdings nur für $\boxed{\nu \neq 0}$. (Das heisst: Jeder Komponente von $\psi' = (\psi'_{1l}, \psi'_{2l})$ $l = 1, 2, 3, 4$ bildet ein Turing System).

Wir wollen die Bedeutung der Bedingung $\boxed{\nu \neq 0}$ unterstreichen: Die stationäre Zustände von dem System (1.10) sind durch die Bedingung $(\partial c/\partial t) = 0$ definiert; sie bedeutet:

$$\dot{\psi}' = \dot{\psi}'_1 = 0 \tag{2.38}$$

Die stationäre Zustände von (2.35) bzw. (2.36) werden daher durch

$$\begin{aligned} \psi'_2 &= 0 \\ f(\psi', \mu) &= \nu\psi'_2 \end{aligned} \tag{2.39}$$

definiert.

Wir wollen diese mit folgender klasischen Betrachtung vergleichen: Die durch $(\partial c/\partial t) = 0$ definierten stationären Zustände sind durch die elliptischen DGLen

$$D\nabla^2 c + f(c) = 0 \tag{2.40}$$

charakterisiert. Eine Lösung als partielle DGLen (siehe Fife [N-27]) liefert ähnliche Feststellung wie wir hier unterstreichen wollen.

Ein anderes klassisches Verfahren ist die Betrachtung von dem System (2.40) als gewöhnliche DGLen 2. Ordnung, unter der impliziten Annahme, daß die Zeit keine Rolle mehr spielt. Das Einsetzen von

$$\begin{aligned} c &= \psi^*(\omega \cdot x) \\ \xi' &= \omega \cdot x \qquad \xi + \nu t = \xi' \end{aligned} \tag{2.41}$$

in(2.40) führt zu dem System:

$$(2.42)\qquad \begin{pmatrix} \dot{\psi}_1^* \\ \dot{\psi}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{pmatrix} + \frac{1}{D(\psi^*)\omega^2} \begin{pmatrix} 0 \\ f(\psi^*, \mu) \end{pmatrix}$$

- ein Sonderfall von (2.35) bzw. (2.36), der nur durch $\nu = 0$ gegeben wird.

Aber alle Komponenten von $\psi^* = (\psi_1^*, \psi_2^*)^T$ sind total entartet, d.h. alle Eigenwerte verschinden identisch; Ausnahme ist: $F^* = (0, f(\psi^*, \mu))^T$ besitzt mindestens ein lineares Glied bezüglich ψ_1^*.

Für alle andere Fälle muß eine plausiblere Begründung für Turing-Verhalten (nur ein Eigenwert ist Null) mancher chemischer Systeme gefunden werden. Die Lösung besteht aus folgenden zwei Schritten:

a) $\nu \neq 0$ wird vorausgesetzt für stationäre Zustände, egal ob diese durch SW- oder TW-Wellen charakterisiert sind. Um die Notwendigkeit dieser Annahme einzusehen, betrachten wir $\xi = \omega \cdot x - \nu t$ im 3-dimensionalen Raum, Abb. 2.25:

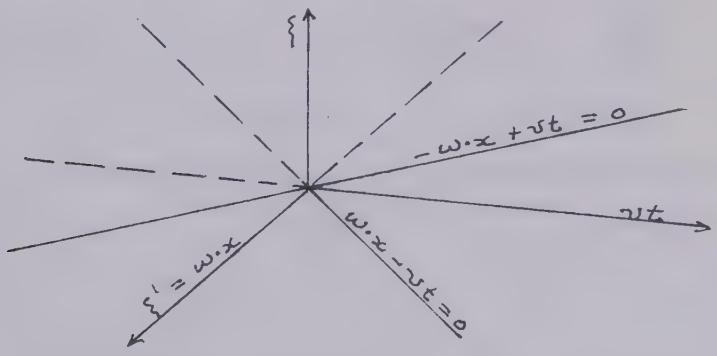


Abb. 2.25

Auf allen Hyperebenen der Form

$$(2.43)\qquad (-\omega \cdot x)n + \nu t = 0$$

erhalten wir

$$(2.44)\qquad \xi' = (n+1)\,\omega \cdot x$$

für die $\xi' = \omega \cdot x$ ein Sonderfall ist. Benutzt man (2.44) in der Substition (2.41) anstatt ξ', so ergibt sich das System:

$$(2.45)\qquad \begin{pmatrix} \dot{\psi}_1^* \\ \dot{\psi}_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \end{pmatrix} + \frac{1}{D(\psi^*)\omega^2(n+1)^2} \begin{pmatrix} 0 \\ f(\psi^*, \mu) \end{pmatrix}$$

Das Heißt: Es gibt eine Vielzahl von stationären Zuständen, je nachdem auf welcher der Hyperebenen (2.43) man sich befindet; siehe Fife [N-27] für ähnliche Ergebnisse mit Hilfe der Spekraltheorie elliptischer DGLen.
Damit haben wir erhalten, daß $v \neq 0$ implizit in stationären Zuständen enthalten ist. Wir zeigen nun, wie dies explizit in Zustandsbeschreibungen einzubauen ist.

b) Es wird von den Übergängen zwischen stationären Zuständen ausgegangen, unter Heranziehung der erweiterten Eigenschaften von Transportkoeffizienten, wie sie in §2.2.2 erörtert wurden.
Demnach ist eine Evolution durch die allgemeine hyperbolisch-parabolische DGLen gekennzeichnet:

$$(2.46)\qquad \frac{\partial C}{\partial t} + \eta(C)\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = \nabla(D(C)\nabla C) + f(C, \mu)$$

Durch Einsetzen der Substitution (2.34) entsteht die Gleichung:

$$(2.47)\qquad v^2\eta(\psi')\frac{d^2\psi'}{d\xi^2} - v\frac{d\psi'}{d\xi} = D(\psi')\omega^2\frac{d^2\psi'}{d\xi^2} + f(\psi', \mu)$$

dies ergibt das System

$$(2.48)\qquad \begin{pmatrix} \frac{d\psi_1'}{d\xi} \\ \frac{d\psi_2'}{d\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & \frac{-v}{v^2\eta(\psi_1') - D(\psi_1')\omega^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \end{pmatrix}$$

$$+\frac{1}{\nu^2\eta(\psi_1')-D(\psi_1')\omega^2}\begin{pmatrix}0\\ f(\psi_1',\mu)\end{pmatrix}$$

In Vektorform haben wir:

$$\dot{\psi}' = A'(\nu, D(\psi'), \omega)\psi' + F'(\psi', \nu, D(\psi'), \omega, \mu)$$

(2.49)

$$\psi' = (\psi_1', \psi_2')^T,\quad F = [\nu^2\eta(\psi') - D(\psi')\omega^2]^{-1}(0, f(\psi', \mu))^T$$

wobei die (8 x 8) Matrix A' von ähnlicher Form ist, wie in (2.37); die Diagonalelemente der Diagonalmatrizen A_2', A_4' sind in diesem Fall 1 bzw. $-\nu[\nu^2\eta(\psi') - D(\psi')\omega^2]^{-1}$
An stationären Zuständen treten die Eigenschaften APTC-1 bis APTC-6 ein (§2.2.2), so daß die Matrix A' (in (2.49)) sich auf die Matr. $\tilde{A}$ in (2.37) reduziert (falls die stationären Zustände durch SW-Wellen charakterisiert sind), oder sie reduziert sich auf

(2.50)
$$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & \dfrac{-\nu}{\eta^*\nu^2 - d^*\omega^2}\end{pmatrix}$$

(für TW-Wellen Charakterisierung der stationären Zustände).
Offenbar ist nur die Aussage $\boxed{\nu \neq 0}$ notwendig für Turing-Verhalten.

ANMERKUNG 2.32: Der Grund für (2.43) ist wie folgt: Neben der üblichen verzahmten Beziehung zwischen ν und ω, siehe z.B Leibovich et al [N-28], ist es bedeutungsvoll und ergebnisreich, die Abhägigkeit von ν und ω vom Verdichtungszustand (energetisch als auch materielle) zu betrachten; auf ein Eingehen in diese tiefere Einblicke über die Beschaffenheit von Wellenzuständen von Evolutionsprozessen wir hier verzichtet, da sonst, der Rahmen dieser geprengt wird.

Aus den obigen Erläuterungen ergeben sich zwei wichtige Ergebnisse:

LEMMA 2.33: *Evolution im Sinne von Definition 2.14 vollzieht sich stets mit endlicher Relaxationsgeschwindigkeit, falls sie (die Evolution) Turing-Verhalten besitzt.*

LEMMA 2.34: *Die Wellen, die einen SW-Wellen stationären Zustand auszeichnet ist notwendigerweise nur vom Ort (d.h. Raumvariablen) abhängig.*

Das letztere Ergebnis hat interessante Konsequenzen für die mathematische Formulierung von Evolutionsproblemem, siehe Kapitel 4 für eine spezielle Formulierung, und auch Mbaeyi [F-20] und [G-16] .

ANMERKUNG 2.35: Oblicherweise geht man in klassichen Betrachtungen von stattionären Zuständen aus zur Frage der Übergänge zwischen stationären Zuständen. Die Wahl der Umkehrung hier bedeutet eine Inversefragestellung, wie sie in vielen Fällen angewandt wird, zur Vereinfachung und neuen Beleuchtung von Problemen. Diese Annährung hat noch einen weiteren Vorteil: sie macht eine separate neue Formulierung des Konditionierungsproblems, sprich Übergangsproblems, überflüssig. Dadurch, Kapitel 4, kann die Aufmerksamkeit auf die Frage der inneren Beschaffenheiten konzentriert werden, die für die Präzisierung der Übergänge notwendig sind.

Als zusammenfassendes Ergebnis haben wir:

LEMMA 2.36: *Flip-Flop ist ein Grundprinzip der Evolution*

2.3: Transformation und Erweiterung des Seeligschen Modells mittels nichtlinearer Evolutionstheorie

In diesem Abschnitt soll das System von Gleichungen eingeführt werden, die sich aus den vorausgegangenen konzeptionellen Entwicklungen ableiten lassen. Aber zunächst werden parallele Prozesse betrachtet, deren inneren Zusammenhänge sich durch hierarchische Modellierung verdeutlichen lassen. Es folgt denn die Nachbildung der Seeligscher Aufgabe im Sinne der funktionellen Zusammenhänge, die einem Nervenimpuls zugrunde liegen.

2.3.1: EINFOHRENDE BEISPIELE: 'OREGONATOR' MODELL UND ANDERE PULSIERTE CHEMISCHE KINETIKEN

Als Beispiel für die Darstellung von Pumpprozessen durch hierarchische Modelle, betrachten wir folgendes 'Oreganator' Modell, siehe Janz et al [C-16] :

$$
\begin{aligned}
A + Y &\xrightarrow{k_1} X + P \\
X + Y &\xrightarrow{k_2} 2P \\
A + X &\xrightarrow{k_3} 2X + Z \\
X + X &\xrightarrow{k_4} A + P \\
Z &\xrightarrow{k_5} \tfrac{1}{2} Y
\end{aligned}
\qquad (2.51)
$$

Diese Reaktionen liefern ein Gleichungssystem, das dem Seeligschen (1.7) ähnlich ist, siehe Janz et al [C-16], Seite 3133.
Das Reaktionsschema (2.51) ist bildlich so vorzustellen:

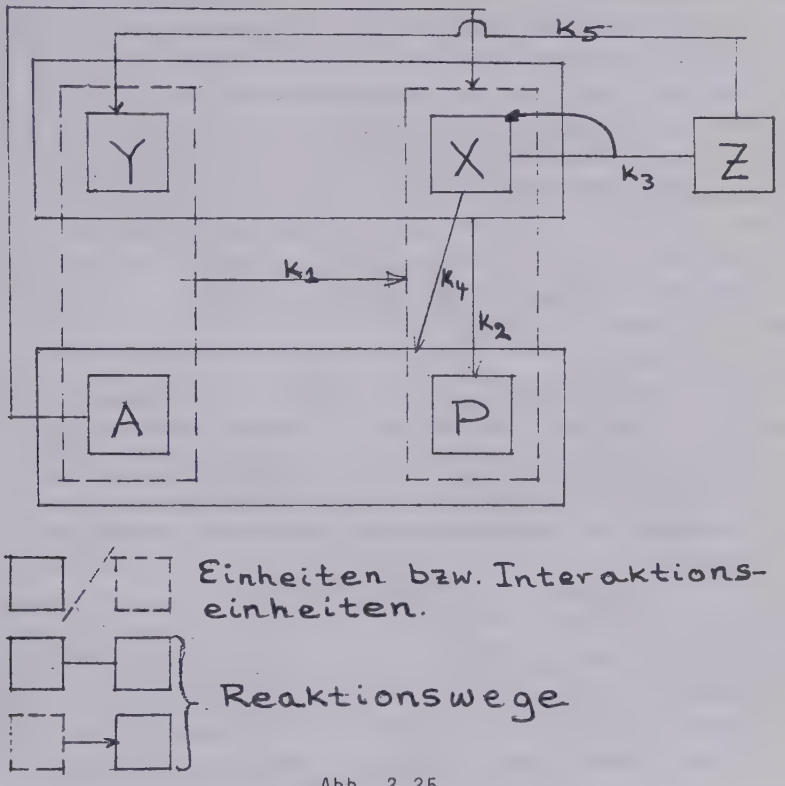


Abb. 2.25

In der Form eines hierarchischen Modells ergibt sich folgendes Bild

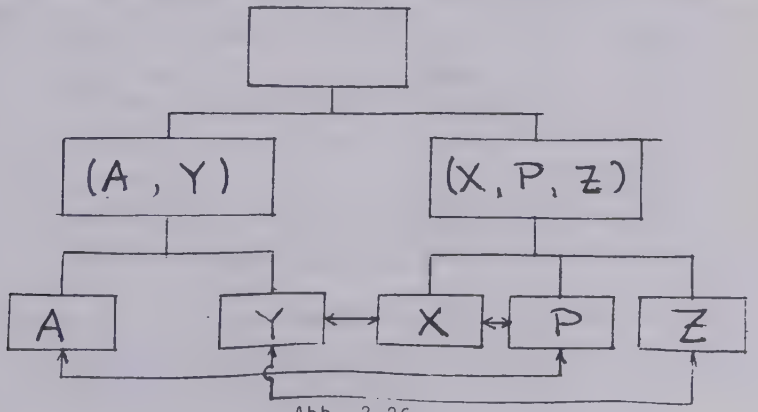


Abb. 2.26

Als Alternative kann man auch (A, P) , (Y, X, Z) benutzen; es ist ist nicht entscheidend, zu welchem Paar Z zugeordnet wird. Durch Zulassen von Zu- bzw. Abflüsse zu bzw. von A, Y erhält man ein offenes System, das trotzdem durch eine geschlossene hierarchische Darstellung eingefangen wird. Das Oreganator Modell zeigt die Eigenschaft, ein Paar von synchronisierten Oszillationen zu besitzen, siehe Janz et al [C-16] . Diese makroskopische Eigenschaft ist in der hierarchischen Darstellung insofern erfasst, als die Interaktion von ρ_1 = (A, Y) , ρ_2 = (X, P, Z) bzw. ρ_1' = (A, P) , ρ_2' = (Y, X, Z) in der Erzeugung von ρ bzw ρ' . Mittels dieser kann man direkt die Grenzen ermitteln, in denen die Oszillationen von ρ_1 , ρ_2 bzw ρ_1' , ρ_2' sich gegenseitig ablösen.

Als nächstes Beispiel betrachten wir das Gierer-Meinhardt Modell (abgekürzt G-M-Modell) der Zellenentwicklung, siehe Meinhardt und Gierer [A-46] , Gierer und Meinhardt [C-14] ; es ist folgendermassen beschaffen: Es wird von 2 Konzentrationen P , P' - Aktivierungs- und Inhibitionskonzentrationen - ausgegangen. Eine der Konzentrationen, P, wird durch die Grundrate P_o erneuert. Teile von P_o werden in P_a (Aktivatorkonzentrationen) verwandelt, während Teile von P' in P_h (Inhibitorkonzentration) wandern. P_a wird durch autokatalytische Selbstreplikation in Abhängigkeit von P_h erneuert, aber erleidet auch einen gewissen Zerfall. Hier wiederum, ist die Lage der des Oreganator Modells sehr ähnlich. Das G-M-Modell hat folgende bildliche Darstellung:

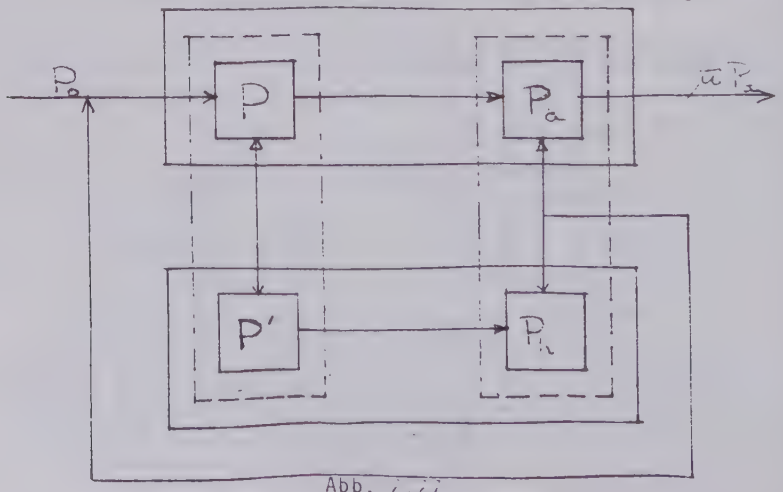


Abb. 2.27

Folgendes wäre ein denkbares Schema einer chemischen Kinetik für das G-M-Modell:

$$
\begin{aligned}
& P_o + P \longrightarrow P \\
(2.52)\quad & P + P' \longrightarrow P_a + P_h \\
& P_a \longrightarrow ? \\
& P_a + P_h \longrightarrow P_a + P' + \tilde{\tilde{P}}
\end{aligned}
$$

Hierarchisch sieht das G-M-Modell folgendermassen aus:

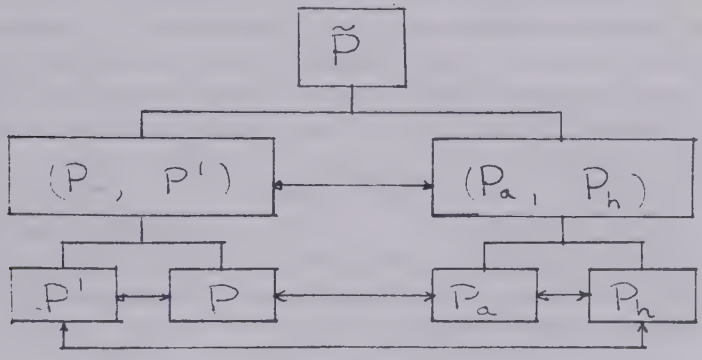


Abb. 2.28

Als nächstes wollen wir die Ähnlichkeit zwischen dem Oreganator Modell und dem Seeligschen Reaktionsschema herausstellen: Das Schema in Abb. 1.Ia konnte folgende Kinetik darstellen:

$$
\begin{aligned}
& u + X \longrightarrow X + \vartheta \\
& X + M \longrightarrow MX \\
(2.53)\quad & MX + X \longrightarrow MX_2 \\
& MX_2 \longrightarrow \hat{\sigma} MX \\
& \hat{\sigma} MX + Y \longrightarrow M + Q + P
\end{aligned}
$$

In dieser Kinetik bedeuten u, ϑ, $\hat{\sigma}$ folgendes:

a) u bezieht sich auf die Zuflüsse j_1 in Abb. 1.1a;

b) ϑ bezieht sich auf die Abflüsse von X mit dem Aktivitätskoeffizienten k_o

c) $\hat{\sigma} > 1$ bedeutet bezüglich MX ein multiplikativer Zerfall von MX_2; (dies schafft die Grundlage für positiven Populationsunterschied zwischen dem Ruhezustand und dem Zustand

des Aktionspotentials einer Nervenfaser, siehe unten); Mit $0 < \hat{\sigma} < 1$ wird das Umgekehrte gemeint (d.h. rekombinatorische Reaktion), wie dies während der Refraktierphase einer Nervenfaser auftritt.

Es lässt sich leicht nachprüfen, daß die Reaktionsschematta (2.51) und (2.53) einander ähnlich sind.

2.3.2: HILFSBEISPIEL: NERVENFASER MIT ERGÄNZUNGEN ZU EXISTIERENDEN EXISTIERENDEN MODELLEN

Das Axon (Nervenfaser/Neuron) ist ein 1-dimensionaler Leiter mit dem Flip-Flop-Prinzip. Es bietet daher ein geeignetes Beispiel für die Modellierung der gesuchten Seeligschen Kette, Abb. 1.2. Dabei wird die stillschweigende Annahme gemacht, das Axon sei eine Art Ionensystem; hierzu für Rechtfertigungen verweisen wir auf Chalazonitis [A-7], Hart [A-26], Abelson et al [A-1], Brodersen et al [E-9], Chynowett A-8, Classen [A-9], Giordmaine [A-17], Hillig [A-30], Metz [A-47], Miller [E-40], Rajchman [E - 49]). Das klassiche Modell für Nervenaktivitätten ist das H-H-Modell (Hodgkin-Huxley-Modell):

$$\frac{1}{R}\nabla^2 V = c\frac{\partial V}{\partial t} + G(V,m,n,b)$$

$V \equiv$ Nervenpotential mit folgenden Parametergleichungen (Nebenbedingungen):

(2.54)
$$\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma_n(n_\infty(V) - n)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma_h(V)(h_\infty(V) - h)$$

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \gamma_m(V)(m_\infty(V) - m)$$

$$0 < \gamma_n, \gamma_h < c\,\gamma_m$$

$$0 < n_\infty, h_\infty, m_\infty < 1$$

$$G(V,m,n,b) = \bar{g}_{Na} m^3 h (V - V_{Na^+}) + \bar{g}_{K^+} n^+ (V - V_{K^+}) + \bar{g}_{Cl^-}(V - V_{Cl^-})$$

$\bar{g}_{Na^+}, V_{Na^+}$ bestimmte Konstante für Na^+

$\bar{g}_{K^+}, V_{K^+}$ bestimmte Konstante " K^+

$\bar{g}_{Cl^-}, V_{Cl^-}$ " " " Cl^-

m, n, h beeinflussen die Permeabilitäten der Ionen durch die Membran, siehe §2.3.3 unten.

Aber dies beschreibt nur die phänomenologische Effekte - die Entstehung des Aktionspotentials. Betractet man das Seeligsche Reaktions-Diffusions-System - Gleichung (1.10) bzw dessen Erweiterung (2.28) in dieser Arbeit - als die chemische Kinetik, auf die die Entstehung des Aktionspotential basiert ist, so beschreibt dies nur die Produktion der Materie, die dem Aktionspotential zugrunde liegt.

Eine geschlossene Beschreibung muss die beiden Aspekte mit einander koppeln; dies geschieht über den Weg der allgemeinen nichtlinearen Formulierung der Evolutionsprozesse, sie sie in §2.2.1 erörtert wurde, siehe Mbaeyi [C-19] , [A-41] , [A-42] . Dabei bedient man sich das '5-State-Automat'-Prinzip (§2.2.1).

Bezogen auf Nervenaktivitäten, lässt sich dies mit Hilfe von der erweiterten Form von Abb. 2.18 erklären: Hierzu benötigen wir nur folgende wesentliche Merkmale der Nervenaktivitäten, siehe Noback und Demarest [A-48] :

a) Ein gereizter Nerv erreicht zunächst ein 'Trigger-Threshold';
b) entweder zerfältt das Schwellenpotential, oder es wird weiter verstärkt zu einem Nervenimpuls (Threshold Pottential) - eine längst der Nervenfaser fortpflanzende Welle.
c) Einem Aktionspotential folgt eine Hyperpolasierung als erster Schritt zur Rückkehr zum Ruhepotential.
d) Der Hyperpolasierung folgt ein geschwächtes Nackklingen des Aktionspotentials mit anschließender Rückkehr zum Ruhepotential

Die gekoppelten '5-State-Automat'-Prinzipien, die hier zum Tragen kommen, lassen sich im Sinne der drei Klassen von Formen von Reaktionen (§2.1.4) darstellen - durch eine wesentliche Erweiterung von Abb. 2.18; als Ergebnis erhält man Abb. 2.29 (auf Seite 86).

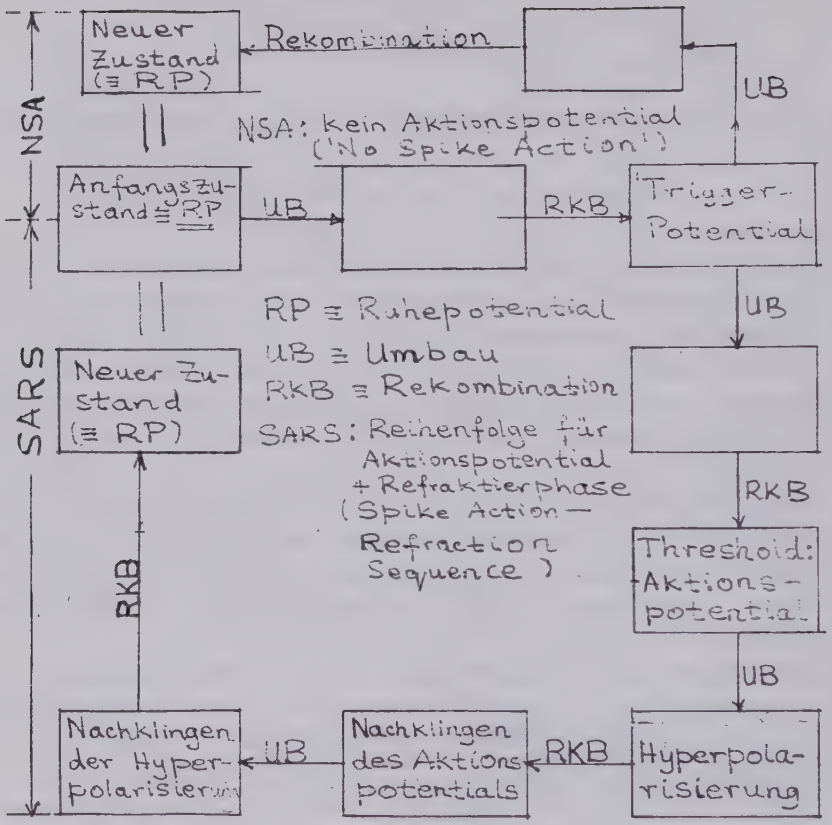


Abb. 2.29

Diese Darstellung führt zu folgender erweiterten Darstellung der Nervenaktion:

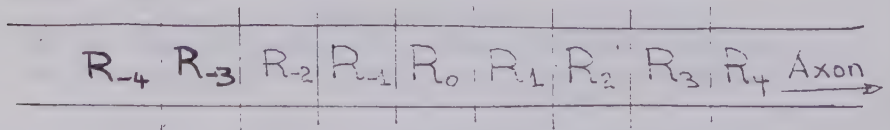


Abb. 2.30:

R_4 und R_{-4} : Stelle des Ruhepotentials

R_2 : Stelle des 'Trigger-Thresholds'

R_0 : Threshold

R_{-2} : Nachkingen des Aktionspotentials

R_1 , R_3 / R_{-1} R_{-3} : Stelle des Umbaus

In der klassischen Darstellung der Nervenaktion werden die Gebiete R_{-4} bis R_{-1}, und R_1 bis R_4 zu einzelnen Gebieten zusammengefasst, so daß das Bild (Abb. 2.31 unten) entsteht:

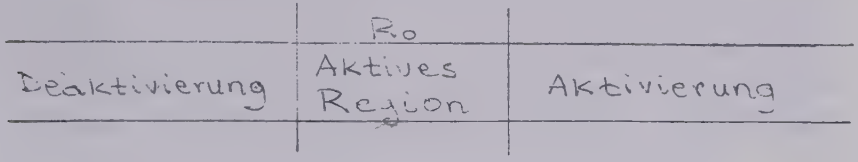


Abb. 2.31

Die Vereinigung der Gebiete R_{-4} bis R_4 wird NERU bezeichnet, d.h. NERU = $\bigcup_{s=-4}^{+4} R_s$, siehe Mbaeyi [A-41] und [A-42]. Die Fortpflanzung eines Nervenimpulses, Länge [0, 1] ergibt dann eine Matrix, NEREMAX genannt, siehe Mbaeyi [A-41]:

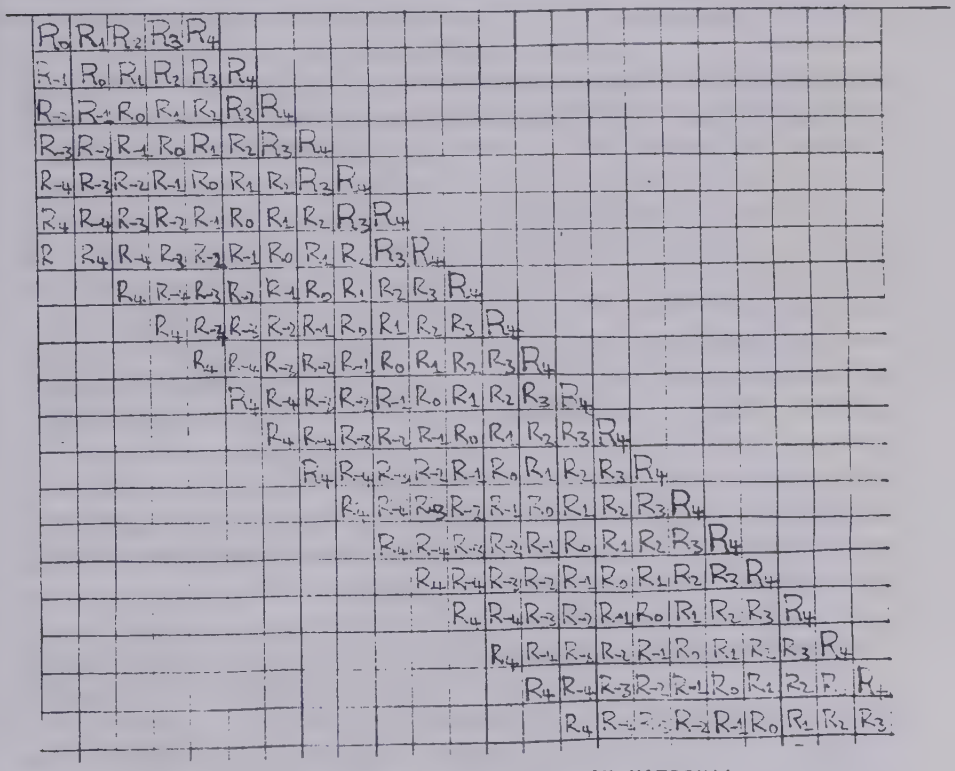


Abb. 2.32 NEREMAX ('NEURAL RELAY MATRIX')

Die Flüsse, die NEREMAX ermöglichen, sind bildlich wie folgt, Abb. 2.33

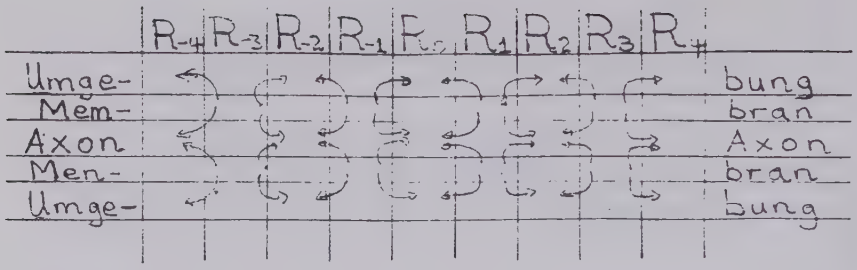


Abb. 2.33

Abb. 2.33 liegt folgende Konstruktion zugrunde: Diffusion - ungerichteter Transport irgendwelcher Teilchen - wird eine gewünschte Richtung zugewiesen, mit Hilfe vom Konzept der 'Saltatorischen Diffusion'.
Saltatorische Diffusion, siehe Mbaeyi [C-19] für genauere Definition, ist als eine Analogie es Huygenschen Prinzips der Optik gedacht, und beschreibt folgende Evolutionsvorgänge: Seien die physikalischen Elemente eines Prozesses in Unterprozessen (durch Hierarchiegruppierungen) aufgeteilt, dann, bei betimmten Gegebenheiten, erfolgt die Evolution (Interaktion der Unterprozesse) des Prozesses nur als Weitergabe (Ausbreitung) des allgemeinen phänomenologischen Effektes (Aktionpotential im Falle der Nervenfaser), ohne Vermischung der physikalischen Unterprozesse. Evolutionsfortpflanzung mittels saltatorischer Diffusion ist daher dem Relaisprinzip verwandt; gron veranschaulicht, Evolutionsfortpflanzung wird mit rollendem Einsatz vergliechen. Durch dieses Prinzip gleicht die Fortpflanzung des Nervenpotentials der zündenden Übergabe von Wellenfronten, wobei die Übergabestelle als neue Wellenquelle aufgefasst wird, vergleichbar mit dem Prinzip der 'sekundären Wellen' der Huygenschen Wellenoptik.

Zur Veranschaulichung: Abb. 2.34a veranschaulicht das Huygensche Prinzip, Abb. 2.33b die Fresnelsche Erweiterung davon. Hierzu: OX ist die Fortpflanzungsrichtung. Vom Punkt O ausgehend, werden entlang YOY´ Kreise (gleichen Radius) gezogen, deren Zentren in Abständen von by liegen. Dadurch entsteht der Front Y´O´Y´´, Abb. 2.34a. Zur Aufklärung des Interferenzphänomens führte Fresnel eine Erweiterung des Huygenschen Prinzips ein - Abb. 2.34b

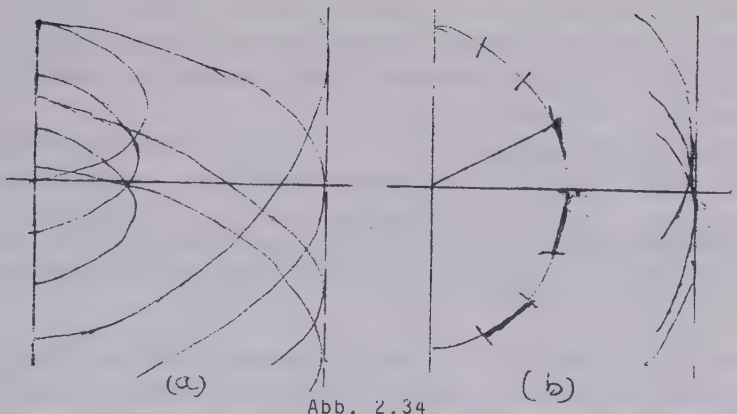


Abb. 2.34

In der Fresnelschen Erweiterung, wird der Wellenfront (und nicht YOY´ wie vorher) in finite Elemente zerlegt; jeder dieser Elementarteile wird zur Quelle gleichartiger Kreise.
Zum Vergleich betrachten wir der Einfachheit halber ein anregbares chemisches Medium (siehe §2.5.2 unten) in $\mathbb{R}^2$, Abb. 2.35a:

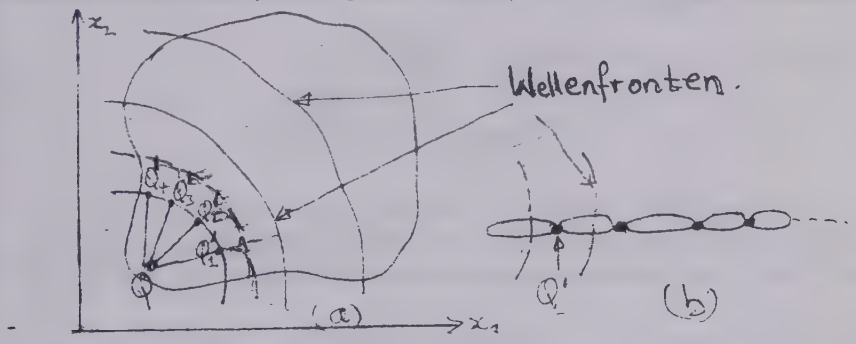


Abb. 2.35

Es wird angenommen, daß eine Anregung mit Q - als Quelle, sich über das ganze anregbare Medium ausbreitet. Man stellt sich die weitere Ausbreitung vor als die Übergabe der Anregung an die Stellen Q_1, Q_2' ,....., Q_s'; von diesen Stellen gehen dann die Wellen aus, die den Wellenfront W_1W_2 bilden. (Diese Vorgänge sind auch in der Mechanik der Flüssigkeitsbewegung zu beobachten).
Es ist leicht zu sehen, daß die Frenselsche Deutung des Huygenschen Prinzips und der Zerlung in Abb. 2.35a im Prinzip ähnlich sind; der Unterschied zwischen den beiden liegt auch auf der Hand: Während die Fresnelsche Zerlegung den Wellenfront betrifft, ist die Zerlugung für die chemische Kinetik (und andere Kontinua) auf das

Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ bezogen, in dem der Prozess sich befindet.
Im Gegensatz zum Huygenschen Prinzip betsitzt saltatorische Diffusion die Fähigkeit eines abgrenzenden Mechanismus als zusätzliche Eigenschaft, siehe Mbaeyi [C-19] .
Abb. 2.35b ist eine Spezialisierung von Abb. 2.35a zu einer Dimension, die dem Nervenfaserproblem näher kommt.

ANMERKUNG 2.37: Ein anderer Vergleich für saltatorische Diffusion bietet der Flüssigkeitstransport mittels Flüssigkeitszellen, die sich während der Bewegung der ganzen Flüssigkeitsmasse dynamisch in Gleichgewicht halten.

Das Heißt: Durch Gebietslokalisierung kann der Diffusion Richtungsweisung zugeordnet werden. Dadurch ist es möglich, sich der Diffusionsausbalanzierung bzw. -Abgrenzung als Steuerungsmittel zu bedienen (wobei innere Randwertaufgaben, Kapital 3, eine wichtige Rolle spielen).
Diese Gebietslokalisierung trifft man z.B. bei Photomultiplikationsprozessen, siehe Anordnungsbeispiel dafür, Abb. 2.36, aus Seib und Aukermann [A-63] :

Abb. 2.36: Schema für Photomultiplikationsprozesse

Die Gebietslokalisierung der Diffusion ist auch in der Phänomenologie der Liesegangschen Ringe anzutreffen, siehe Oswald [N-12].

Die Heranziehung der hierarchischen Modellierung ermöglicht gerade die lokale Steuerung von Diffusionsströmen, wie dies bei Elektronen.Löchern-Diffusion notwendig ist, siehe unten.

Die Ionenonzentrationen, die in den Gebieten $R_4 \equiv R_{-4}$ und R_o (Abb. 2.30) gemessen werden, weisen die Nervenaktivität als einen Prozess der Populationsinversion aus. Daher auch die näherliegende Beziehung zur Seeligschen Aufgabe. Ist NERU von der Länge l^*, dann haben die Dichtefunktionen für die Ionenkonzentrationen, und die begleitende Bioelektrizität als Funktion von $x \in [0, l^*]$ folgende Verläufe, Abb. 2.37:

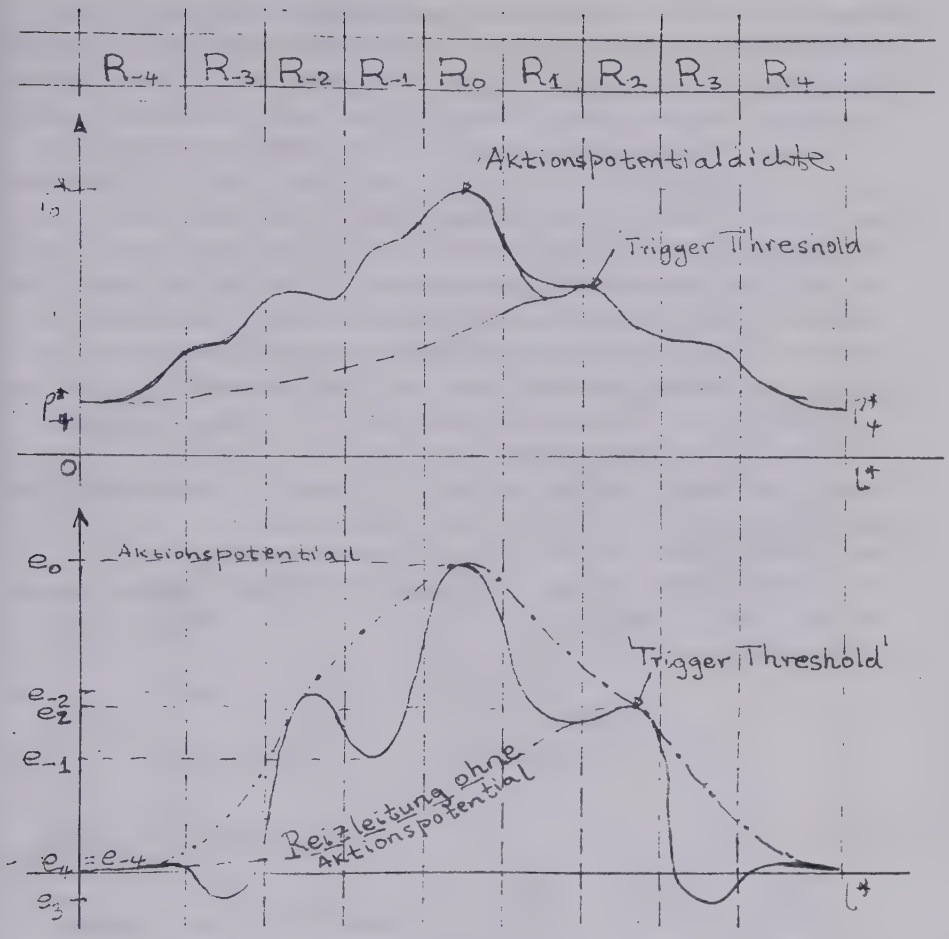


Abb. 2.37

Durch folgende Zuordnungen stellt man die Beziehung zwischen diesen beiden Prozessen der Populationsinversionen dar:

Axon	R_{-4}	R_{-3}	R_{-2}	R_{-1}	R_0	R_1	R_2	R_3	R_4
Seelig	M	MX+Y	MX	MX+Y	MX	MX_2	MX	MX_2	M

(Die Beziehungen in der unteren Reihe beziehen sich auf das Seeligschen Schema in Abb. 1.1a; dabei wird an das vorgeschlagene Reak-

tionsschema (2.53) gedacht. Für vergleichbare Reaktionskinetike der Laserphänomenologie verweisen wir auf Gross et al [E-21], Seite 703 - 732).
Diese obige Zuordnung soll keinesfalls zur der Interpretation führen, das Seeligsche Reaktionsschema sei dem NERU äquivalent. Ein Blick auf NEREMAX (Abb. 2.32) seigt, daß jeder Punkt des Axons den Kreislauf der Populationsinversion einmal selbst durchläuft, um die Fortpflanzung eines Nervenimpulses zu ermöglichen. Somit ist die obige Zuordnung nur im makroskopischen Sinne zu verstehen. Da jedes Gebiet die Populationsinversion durchläuft, bleibt NERU und seine dynamische Fortschiebung längst der Länge eines Axons eine Koppelung von mehreren Kreisläufen der Populationsinversionen. Im Sinne der Abb. 2.9 bedeutet die Zuordnung die Phase, in der man ρ_1' bis ρ_m' zu erwarten hat.
Weitere Zuordnungen werden in §2.3.4 erörtert, im Zusammenhang mit der Einführung von CTD der Informationsverarbeitung.
Die hierarchische Formulierung der Beziehung von R_{-4} bis R_4 untereinander führt zu: e, ρ , wodurch NERU als ganzes gekennzeichnet wird (siehe §2.2.1), stellt man sich in der Form von Wellengruppen vor, Abb. 2.38:

Abb. 2.38

(Vgl die Kurven in Abb. 2.37 unter Hinzunahme der gestrichenen Linie der Form —•—•—•—).
Wellengruppen spielen in der Nachrichtentechnik eine wichtige Rolle, siehe Schwarz et al [E-53] , da sie sich häufig als (Zusatzs-)Quelle für das Rauschen im System erweisen; (für spätere stochastische Betrachtungen über die Mechanik der Schwankungen der Nervenaktivitäten wird dies als Grundlagen herangezogen).

2.3.3: NICHTLINEARES EVOLUTIONSMODELL DER PROBLEMSTELLUNG

Auf der Grundlage der vorausgegangenen Erläuterungen wird nun die hier betrachtete Aufgabe durch Gleichungssysteme dargestellt; dabei werden noch einige Voraussetzungen vorausgeschickt. Als erstes werden die Permeationskoeffizienten Π_x , Π_y der Seeligschen

Gleichungen, siehe Gleichungssystem (1.7) betrachtet. Als Störungsdarstellung betrachten wir die gesuchte Seeligsche Kette (Abb. 1.2) in der Form einer dunnen Streife in der x_1-x_2-Ebene:

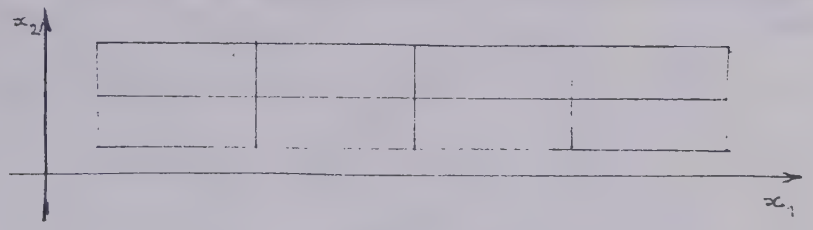


Abb. 2.39

Dann lässt sich $\Pi_x(\xi_1 - \xi_2)$ in den Gleichungen in (1.7) wie folgt approximieren:

$$\Pi_x(\xi_1 - \xi_2) = \Pi_x\left(\xi_1 - \xi_1^{(0)} + \xi_1^{(0)} - \xi_2 - \xi_2^{(0)} + \xi_2^{(0)}\right)$$

$$= \Pi_x(\xi_1 - \xi_1^{(0)}) - \Pi_x(\xi_2 - \xi_2^{(0)}) + \Pi_x(\xi_1^{(0)} - \xi_2^{(0)}) \tag{2.55}$$

$\xi_1^{(0)}, \xi_2^{(0)} \equiv$ gewisse Konstante

Setze

$$\Pi_x(\xi_1 - \xi_1^{(0)}) \simeq \Pi_x \frac{\partial \xi_1}{\partial x_2}$$

$$\Pi_x(\xi_2 - \xi_2^{(0)}) \simeq \Pi_x \frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \tag{2.56}$$

dann erhalten wir:

$$\Pi_x(\xi_1 - \xi_2) \simeq \Pi_x\left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} - \frac{\partial \xi_2}{\partial x_2}\right) + K_1^* \tag{2.57}$$

$$K_1^* = \Pi_x(\xi_1^{(0)} - \xi_2^{(0)}) \equiv \text{const.}$$

Auf ähnlicher Weise ergibt sich für

$$\Pi_y(\eta_1 - \eta_2) = \Pi_y\left(\frac{\partial \eta_1}{\partial x_2} - \frac{\partial \eta_2}{\partial x_2}\right) + K_2^* \tag{2.58}$$

$$K_2^* = \Pi_y(\eta_1^{(0)} - \eta_2^{(0)}) = \text{const.}$$

Mit anderen Wörten: Permeation lässt sich durch geeignete Umformulierung als Fluß in der x_2-Richtung darstellen. Demnach können die Permeationskoeffizienten als Bestandteile der Diffusionskoeffizienten angesehen werden (geeignete innere Randwerte vorausge-

setzt). Wir leiten dies ab.
Aufgrund der Erläuterungen in §2.2.1 wurde das Gleichungssystem (2.28) eingeführt, als die Erweiterung des Gleichungssystems (1.10). (1.10); mit

$$(\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2) \triangleq (C_1, C_2, C_3, C_4) \triangleq C \tag{2.59}$$

heißt dies explizit:

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = D_b(C_b)\nabla^2 C_b + \frac{\partial D_b}{\partial C_b}(\nabla C_b)^2 + f_b'(C_1, \ldots C_4, \mu), \quad b = 1, \ldots, 4 \tag{2.60}$$

Nach der klassischen Annäherung mit Diffusion in der x_1-Richtung und Permeation in der x_2-Richtung, einzeln und unabhägig betrachtet, haben wir (unter Berücksichtigung veränderlichen Koeffizienten):

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D_1(C_1)\frac{\partial^2 C_1}{\partial x_1^2} + \phi + \chi - C_1 - \bar{\rho}_1 - \pi_x \frac{\partial}{\partial x_2}(C_1 - C_2) - K_1^* \tag{2.61}$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = D_2(C_2)\frac{\partial^2 C_2}{\partial x_1^2} + \phi + \chi - C_2 - \bar{\rho}_2 + \pi_x \frac{\partial}{\partial x_2}(C_1 - C_2) + K_1^* \tag{2.62}$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = D_3(C_3)\frac{\partial^2 C_3}{\partial x_1^2} + \alpha(\phi - \bar{\rho}_1) - \pi_y \frac{\partial}{\partial x_2}(C_3 - C_4) - K_2^* \tag{2.63}$$

$$\frac{\partial C_4}{\partial t} = D_4(C_4)\frac{\partial^2 C_4}{\partial x_1^2} + \alpha(\phi - \bar{\rho}_2) + \pi_y \frac{\partial}{\partial x_2}(C_3 - C_4) + K_2^* \tag{2.64}$$

(Zur Vermeidung von Verwechselungen haben wir $\overline{\rho_1}$ und $\overline{\rho_2}$ in (2.61) bis (2.64) benutzt, anstatt die originalen ρ_1, ρ_2 von Seelig; $\overline{\rho}_1$, $\overline{\rho}_2$ bzw ρ_1, ρ_2 sind durch die Identitäten in (1.8) definiert, und als Bezeichnung haben sie nicht gemeinsames mit ρ der nichtlinearen Formulierungen in §2.2.1).

ANMERKUNG 2.38: Im Gleichungssystem (2.60) haben wir

(2.65)
$$\nabla^2 C_b = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) C_b$$

$$(\nabla C_b)^2 = \left(\frac{\partial C_b}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial C_b}{\partial x_2}\right)^2$$

Vergleiche von System (2.60) mit dem System (2.61) bis (2.64) ergeben:

$$D_1(C_1)\frac{\partial^2 C_1}{\partial x_2^2} + \frac{\partial D_1}{\partial C_1}(\nabla C_1)^2 = -\Pi_x \frac{\partial}{\partial x_2}(C_1 - C_2)$$

$$D_2(C_2)\frac{\partial^2 C_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial D_2}{\partial C_2}(\nabla C_2)^2 = \Pi_x \frac{\partial}{\partial x_2}(C_1 - C_2)$$

$$D_3(C_3)\frac{\partial^2 C_3}{\partial x_2^2} + \frac{\partial D_3}{\partial x_3}(\nabla C_3)^2 = -\Pi_y \frac{\partial}{\partial x_2}(C_3 - C_4)$$

$$D_4(C_4)\frac{\partial^2 C_4}{\partial x_2^2} + \frac{\partial D_4}{\partial C_4}(\nabla C_4)^2 = \Pi_y \frac{\partial}{\partial x_2}(C_3 - C_4)$$

Mit einer der folgenden Substitutionen

(2.70)
$$\frac{\partial}{\partial x_2}(C_1 - C_2) = \left[\left(\frac{\partial C_1}{\partial x_2}\right)^2 - \left(\frac{\partial C_2}{\partial x_2}\right)^2\right]\left[\frac{\partial C_1}{\partial x_2} + \frac{\partial C_2}{\partial x_2}\right]^{-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2}(C_3 - C_4) = \left[\left(\frac{\partial C_3}{\partial x_2}\right)^2 - \left(\frac{\partial C_4}{\partial x_2}\right)^2\right]\left[\frac{\partial C_3}{\partial x_2} + \frac{\partial C_4}{\partial x_2}\right]^{-1}$$

oder

(2.71)
$$(C_1 - C_2) = (C_1^2 - C_2^2)(C_1 + C_2)^{-1}$$

$$(C_3 - C_4) = (C_3^2 - C_4^2)(C_3 + C_4)^{-1}$$

lässt sich schnell ausrechnen, daß Π_x und Π_y Funktionen der Diffusionskoeffizienten

Mir anderen Wörten: Permeation lässt sich durch Dffusion und Gradienten in der nichtlinearen Formulierung ersetzen. In den Reihenentwicklungen (2.25) und (2.26) kommt dies ganz deutlich zum Ausdruck; die Einsckränkung dieser Reihenentwicklungen auf die x_2-Richtung (nur für die unterste Hierarchie in Abb. 2.10) ergibt die Koeffizienten für Bewegungen in der x_2-Richtung; dies wird der Permeation gleichgesetzt.
Auf dieser Weise lassen sich die Parameter Π_x und Π_y durch $D_b(c_b)|_{x_1=0,\, x_2\neq 0}$ approximieren. Das heisst: Die Festlegung geeigneter (inneren) Randwerte ist die innere Beweglichkeit zu erfassen; äquivalent dazu kann man sich beweglicher Randwerte und Volterra IGLen bedienen, siehe Kapitel 5 unten.

Als nächstes werden die Glieder verglichen, die in der nichtlinearen Formulierung und im klassischen Schema die äussere Einwirkungen (Zu- bzw Abflüsse) darstellen. Dazu benötigen wir Zerlegungen der Dichtefunktionen für die Materie, siehe Anmerkung 2.8. Dies wird mit Hilfe der Abb. 2.8 bis 2.10 auf die hier gestellte Aufgabe spezialisiert.
Der Abb. 2.9 ordnen wir die Bezeichnung

$$\tilde{\rho} \longleftrightarrow (\tilde{\rho}_1, \dots, \tilde{\rho}_{\tilde{m}}) \longleftrightarrow \{\tilde{\rho}_{i'j'}\} \tag{2.72}$$
$$i' = 1, \dots, \tilde{m}, \boxed{\tilde{m} = 9} \;\&\; j' = 1, \dots, \tilde{n}_{i'} \boxed{\tilde{n}_{i'} = 2}$$

für die Hierarchie, und der Abb. 2.8 die Bezeichnungen:

$$\rho \longleftrightarrow (\rho_1, \dots, \rho_m) \longleftrightarrow \{\rho_{ij}\} \tag{2.73}$$
$$i = 1, \dots, m, \boxed{m = 2}; \; j = 1, \dots, n_i, \underline{n_i = 2} \quad \boxed{m = \tilde{n}_{j'}}$$

Dabei gilt:

$$(\rho_1, \dots, \rho_m) \triangleq (\rho'_{i'1}, \dots, \tilde{\rho}_{i'\tilde{n}_{j'}}) \tag{2.74}$$
$$\rho \triangleq \tilde{\rho}_{i'} \qquad i' = 1, \dots, 9$$

(NERU = gesuchte Kette Seeligscher Oszillatoren wird vorausgesetzt). In Anlehnung an die Zerlegung für E, E_i und E_{ij} (§2.2.1), siehe auch Anmerkung 2.7, werden $\tilde{\rho}$, $\tilde{\rho}_{i'}$ $(\equiv \rho)$,

$\tilde{\rho}_{i'j'}$ ($\equiv \rho_{\iota}$) und ρ_{ij} zerlegt, und zwar wie folgt:

$$\tilde{\rho} = \tilde{\rho}^{(0)} + \tilde{\rho}^{(1)} + \tilde{\beta}\,\tilde{\rho}^{(1)}\rho'\frac{V'}{S}\cdot S \tag{2.75}$$

$$\tilde{\rho}_{i'} = \tilde{\rho}^{(0)}_{i'} + \tilde{\rho}^{(1)}_{i'} + \tilde{\beta}_{i'}\tilde{\rho}^{(1)}_{i'}\rho'\frac{V'}{S_{i'}}S_{i'} + \sum_{i'\neq i''}\tilde{\beta}_{i'i''}\rho^{(1)}_{i''}\tilde{\rho}_{i''} \tag{2.76}$$

(für jedes i', $\tilde{\rho}_{i'} = \rho$);

$$\tilde{\rho}_{i'j'} = \tilde{\rho}^{(0)}_{i'j'} + \tilde{\rho}^{(1)}_{i'j'} + \tilde{\beta}_{i'j'}\tilde{\rho}^{(1)}_{i'j'}\rho'\frac{V'}{S_{i'j'}}S_{i'j'} + \sum_{i'\neq i''}\sum_{j'\neq j''}\beta^{*}_{j'j''}\tilde{\rho}^{(1)}_{i'j'}\left\{\tilde{\rho}_{i''j''} + \tilde{\rho}_{i''}\right\} \tag{2.77}$$

(für jedes j', $\rho_{\cdot\cdot\cdot} = \rho_{i}$), und

$$\rho_{ij} = \rho^{(0)}_{ij} + \rho^{(1)}_{ij} + \beta_{ij}\rho^{(1)}_{ij}\rho'\frac{V'}{S_{ij}}S_{ij} + \sum_{i\neq i_1}\sum_{j\neq j_1}\beta^{**}_{jj_1}\rho^{(1)}_{ij}\left\{\rho_{ij_1} + \rho_{i_1}\right\} \tag{2.78}$$

ρ_{ij} , i = 1, 2 & j = 1, 2 , beziehen sich auf die $C = (C_1$ C_2, C_3, C_4) und damit auf die ξ_1, ξ_2, ξ_3, ξ_4 im Seeligschen Modell, siehe (2.59) oben. Allerdings gibt es einen bemerkenswerten Unterschied: ρ_{ij} ist im Sinne der nichtlinearen Formulierung nach Abb. 2.15 formuliert, während (C_1, C_2, C_3 C_4) im Sinne der klassischen Formulierung erfolgt. (Die klassische Formulierung geht von einer Idealisierung aus, um durch Heranziehung zusätzlicher Faktoren (eine Art 'Verunreinigung der Idealisierung') ein Idealmodell der Realität anzupassen. Die direkte nichtlineare Formulierung lässt die Idealisirung weg).
Aus diesem Grund gelten

$$C_1 = \rho^{(0)}_{11} + \rho^{(1)}_{11}\,;\quad C_2 = \rho^{(0)}_{12} + \rho^{(1)}_{12}$$
$$C_3 = \rho^{(0)}_{21} + \rho^{(1)}_{21}\,;\quad C_4 = \rho^{(0)}_{22} + \rho^{(1)}_{22} \tag{2.29}$$

So daß $\rho_{11} - C_1$, $\rho_{12} - C_2$, usw alle Austauche zwischen einem Prozess und seinen Umgebungen darstellen.

Unter der Voraussetzung unendlicher Relaxationsgeschwindigkeit lautet die Evolutionsgleichung für ρ_{ij}, siehe Mbaeyi [C-19]:

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} = \nabla(D_{ij}(\rho_{ij})\nabla\rho_{ij}) + \overline{\overline{f}}(\rho_{11}, \rho_{12}, \rho_{21}, \rho_{22}) \tag{2.80}$$

$\overline{\overline{f}}$ definieren nur die Interaktionen (in $\Omega \subset \mathbb{R}^d$). Im Sinne des Seeligschen Modells haben wir folgende Zuordnungen:

$$\begin{aligned} \overline{\overline{f}}_{11} &\simeq -c_1 - \overline{\rho}_1 \quad ; \quad \overline{\overline{f}}_{12} \simeq -c_2 - \overline{\rho}_2 \\ \overline{\overline{f}}_{13} &\simeq -\alpha\,\overline{\rho}_1 \quad ; \quad \overline{\overline{f}}_{14} \simeq -\alpha\,\overline{\rho}_2 \end{aligned} \tag{2.81}$$

(vgl. (2.61) bis (2.64); die Benutzung des Approximationszeichens '$\simeq$' geschieht in Hinblick auf die Identitäten in (2.79). Damit (2.80) und (2.28) bzw. (2.60) äquivalente Beschreibungen werden, muß noch gezeigt werden, wie $\chi + \phi$, $\alpha\phi$ usw in (2.80) ihre Einbettung finden. Offenbar sind sie in $\nabla(D_{ij}\nabla\rho_{ij})$ enthalten, wie folgt: Der Einsatz von (2.78) in (2.80) unter Berücksichtigung von (2.79) ergibt unmittelbar:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t}\Big[\beta_{11}\rho_{11}^{(1)}\rho'\frac{V'}{S_{ij}}\varepsilon_{ij} + \sum_{i_1\neq 1}\sum_{j_1\neq 1}\beta_{1j_1}\rho_{11}^{(1)}\rho_{ij_1} + \rho_{i1}\Big] \\ &= -\nabla\{D_{11}(\rho_{11})\nabla[\quad]\} + \chi + \phi \\ &\quad + [D_{11}(\rho_{11}) - D_1(c_1)]\,\nabla^2(\rho_{11}^{(0)} + \rho_{11}^{(1)}) \\ &\quad + \Big[\frac{\partial D_{11}}{\partial \rho_{11}} - \frac{\partial D_1}{\partial c_1}\Big]\Big[(\nabla\rho_{11}^{(0)})^2 + (\nabla\rho_{11}^{(1)})^2\Big] \\ &\quad - 2\,\frac{\partial D_1}{\partial c_1}(\nabla\rho_{11}^{(0)})(\nabla\rho_{11}^{(1)}) \end{aligned} \tag{2.82}$$

Offenbar haben wir: Die Zuflüsse χ, ϕ, $\chi + \phi$ usw sind Funktionen der verschiedenen Beweglichkeiten, vor allem der Beiträge von ausserhalb $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ (ρ' in $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$) und der Austausche zwischen den Komponenten, die durch das Glied $\sum\sum \beta_{ij_1}\rho_{11}^{(1)}(\rho_{ij_1} + \rho_{i1})$ symbolisiert wird. Mit anderen Wörten: Der Ausdruck (2.82) zeigt eindeutig, daß Pumpraten wesentlich von Zustand eines Systems, insbesondere von vorhandenen inneren

Beweglichkeiten abhängig sind. Auf diese Weise erreicht man eine dynamische Definition der Zuflüsse (als Eingabe verstanden). Vereinfachung des Ausdrucks (2.82) erfordert auch gewisse Voraussetzung über $(\partial\rho'/\partial t)$, $\nabla^2\rho'$ usw, die in dem Ausdruck enthalten sind. Eine bfriedigende allgemeine Behandlung dieser Frage übersteigt den Rahmen dieser Arbeit; hierzu verweisen auf die geplanten Aufarbeitung von Mbaeyi [C-19] , wo diesem Problem breiten Raum eingeräumt wird.
Aber für das Seeligsche Modell, als Grundlage für den Vorschlag NEURONICS-I, genügt folgende Annahme:

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} = -(\chi + \phi) \tag{2.83}$$

- die zeitliche Veränderung der Umgebung $\mathbb{R}^d \setminus \Omega$ entspricht ausschließlich den Zuflüssen.

ANNAHME 2.39: *Die Zuflüsse sind auch Funktionen von Raum und Zeit.*

(siehe Struktur des Vorschlags von NEURONICS-I für die volle Bedeutung dieser Annahme).
Demnach haben wir aus (2.83)

$$\rho' = -\int_{t_0}^{t} (\chi + \phi)\, dt \tag{2.84}$$

und

$$\nabla^2\rho' = -\int_{t_0}^{t} (\nabla^2\chi + \nabla^2\phi)\, dt \tag{2.85}$$

$$(\nabla\rho')^2 = \left(\int_{t_0}^{t} (\nabla\chi + \nabla\phi)\, dt\right)^2$$

Der Ausdruck vereifacht sich weiter durch die weitere Annahme:

$$\left|D_{11}(\rho_{11})\right| \simeq \left|D_1(C_1)\right| \;\&\; \left|\frac{\partial D_{11}(\rho_{11})}{\partial \rho_{11}}\right| \simeq \left|\frac{\partial D_1(C_1)}{\partial C_1}\right| \tag{2.86}$$

An Punkten des stationären Zustands ist ohnehin $(\partial D_1/\partial C_1) = 0$ $(\equiv \partial D_{11}/\partial \rho_{11}$) gemäß der Eigenschaften APTC-3 und APTC-4 (§2.2.2).

Für das weitere fassen wir die Raumeffekte (sofern Volumen bzw. Fläche nicht konstant sind), die in $V' S_{ij}^{-1} S_{ij}$ usw (siehe (2.11)) zum Ausdruck kommen, zusammen, durch:

$$\frac{V'}{S_{ij}} S_{ij} = \varphi_{ij} \; ; \; \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{V'}{S_{ij}} S_{ij}\right) = \overline{\varphi}_{ij}$$

(2.87)

$$\nabla\left(\frac{V'}{S_{ij}} S_{ij}\right) = \hat{\varphi}_{ij} \; ; \; \nabla^2\left(\frac{V'}{S_{ij}} S_{ij}\right) = \varphi^*_{ij}$$

Dann vereinfacht und zerlegt sich der Ausdruck (2.82) in folgende Teile:

$$-\frac{\partial \rho_{11}^{(1)}}{\partial t} \beta_{11}\left(\int_{t_0}^{t} (\chi+\phi)\, dt\right) \varphi_{11} - \beta_{11} \rho_{11}^{(1)} (\chi+\phi) \varphi_{11}$$

(2.88)

$$- \beta_{11} \rho_{11}^{(1)}\left(\int_{t_0}^{t} (\chi+\phi)\, dt\right) \overline{\varphi}_{11} = p_{11}\chi + p_{21}\phi$$

$$+ \beta_{11} \nabla\left\{ D_{11} \nabla\left[\rho_{11}^{(1)}\left(\int_{t_0}^{t} (\chi+\phi)\, dt\right) \varphi_{11}\right]\right\}$$

-

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{i \neq 1} \sum_{j_1 \neq 1} \beta^{**}_{1j_1} \rho_{11}^{(1)} (\rho_{1j_1} + \rho_{i_1}) = p_{12}\chi + p_{22}\phi$$

(2.89)

$$- \nabla\left\{ D_{11}(\rho_{11}^{(2)}) \nabla\left[\sum_{i \neq 1} \sum_{j_1 \neq 1} \beta^{**}_{1j_1} \rho_{11}^{(2)} (\rho_{1j_1} + \rho_{i_1})\right]\right\}$$

wobei

$$p_{11} + p_{12} = 1 \quad \& \quad p_{21} + p_{22} = 1 \qquad (2.90)$$

Der Ausdruck (2.88) beschreibt die direkten Zuflüsse aus während der Ausdruck (2.89) die Teile der Zuflüsse, die aus umgebenden Kammern bzw. Komponenten stammen, daher die Bedingung (2.90).

Dividiert man durch mit $\beta_{11} \int (\chi+\phi)\, dt$, so erhält man aus (2.88):

$$\frac{\partial \rho_{11}^{(1)}}{\partial t} \varphi_{11} + \rho_{11}^{(1)} \varphi_{11} \frac{\partial}{\partial t} \ln\left(\int_{t_0}^{t} (\chi+\phi)\, dt\right) - \rho_{11}^{(1)} \overline{\varphi}_{11} \qquad (2.91)$$

$$= -\frac{1}{\beta_{11}^{**}}\frac{\partial}{\partial t}\ln\left(\int(\chi+\phi)dt\right) - (p_{11}-1)\chi - (p_{21}-1)\phi$$

$$+ D_{11}\left[\nabla^2\rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}^{*}\right] + \frac{2D_{11}\left(\nabla\rho_{11}^{(1)} + \hat{\varphi}_{11}\right)}{\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)\,dt}\int_{t_0}^{t}\left(\nabla(\chi+\phi)\right)dt$$

$$+ \frac{D_{11}\left(\rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}\right)}{\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)\,dt}\int_{t_0}^{t}\left[\nabla^2(\chi+\phi)\right]dt$$

$$+ \frac{\partial D_{11}}{\partial \rho_{11}}\left\{\left[\nabla\rho_{11}^{(1)} + \hat{\varphi}_{11}\right] + \frac{\left(\rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}\right)}{\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)dt}\int_{t_0}^{t}\left[\nabla(\chi+\phi)\right]dt\right\}\nabla\rho_{11}$$

wobei

$$\frac{\partial}{\partial t}\ln\int(\chi+\phi)\,dt = \frac{\chi+\phi}{\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)\,dt} \tag{2.92}$$

Es lässt sich leicht nachprüfen, daß durch die Benutzung von $\ln\left[\int(\chi+\phi)dt\right]$ der Ausdurck (2.91) sich vereinfacht in:

$$\frac{\partial\rho_{11}^{(1)}}{\partial t}\varphi_{11} + \left(\frac{1}{\beta_{11}^{*}} + \rho_{11}^{(1)}\varphi_{11}\right)\frac{\partial}{\partial t}\ln\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)dt - \rho_{11}^{(1)}\bar{\varphi}_{11}$$

$$= -(p_{11}-1)\chi - (p_{21}-1)\phi + D_{11}\left[\nabla^2\rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}^{*}\right]$$

$$+ 2D_{11}\left(\nabla\rho_{11}^{(1)} + \hat{\varphi}_{11}\right)\nabla\cdot\left(\ln\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)\,dt\right) + D_{11}\left(\rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}\right) \tag{2.93}$$

$$\left\{\nabla\cdot\nabla\left(\ln\int(\chi+\phi)\,dt\right) + \left[\nabla\cdot\left(\ln\int_{t_0}^{t}(\chi+\phi)\,dt\right)\right]^2\right\}$$

$$+ \frac{\partial D_{11}}{\partial\rho_{11}}\left\{\left[\nabla\rho_{11}^{(1)} + \hat{\varphi}_{11}\right] + \left(\rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}\right)\nabla\cdot\left(\ln\int(\chi+\phi)\,dt\right)\right\}\nabla\rho_{11}^{(1)}$$

Für eine einzelne Komponente schrumpft der Ausdruck zusammen zu

$$\frac{\partial\rho_{11}^{(1)}}{\partial t}\varphi_{11} - \rho_{11}^{(1)}\bar{\varphi}_{11} = -(p_{11}-1)\chi - (p_{21}-1)\phi \tag{2.94}$$

$$+ D_{11}\left[\nabla^2 \rho_{11}^{(1)} + \varphi_{11}^{*}\right] + \frac{\partial D_{11}}{\partial \rho_{11}}\left[\nabla \rho_{11}^{(1)} + \hat{\varphi}_{11}\right]\Big\}$$

- ein reiner Diffusionsausdruck für die Beweglichkeit in Abhängigkeit von Raumeffekten und Zuflüsse von ausserhalb. Somit ist der Ausdruck (2.94) sinnvoll für die Erfassung von den vershiedenen Zuflüssen, die für Abb. 1.2 notwendig sein sollen, sie sie in der Konstruktion von NEURONICS-I zum Ausdruck kommen. Durch diesen Ausdruck sind die Zuflüsse $\chi + \phi$ dynamisch definiert. Durch dieselbe Prozedur definiert man die Zuflüsse bezüglich $\rho_{12}^{(1)}$ $\rho_{21}^{(1)}$, $\rho_{22}^{(1)}$. Die dabei gewonnenen Gleichungen von Typ (2.89) betrachten wir wie folgt an Hand von (2.89): Für eine Komponente (Abb. 1.1b) entfällt ohnehin das Glied ρ_{i_1} in der Gleichung, so daß sich der Ausdruck vereinfacht zu einem reinen Ausdruck der Interaktionen, die die Zuflüsse beeinflüssen. (Für eine Komponente bedeutet $p_{21}\chi + p_{12}\phi$ der Austausch zwischen den Komponenten). Die weitere Betrachtung von Nebenbedingungen von Typ (2.89) verdeutlicht sich am besten durch Erläuterung der Beziehungen zwischen den Modellen:

a) Mit $p_{11} = 0 = p_{21}$ bestimme man $\rho_{11}^{(1)}$ für einen gewissen Wert von φ_{11}, und unter Voraussetzung der Seeligschen Werte von χ und ϕ, siehe Seelig [A-61].

b) Für den gewonnenen Wert von φ_{11}, bestimme man stabile Werte von $\rho_{12}^{(1)}$ für $p_{11} \neq 0$ und $p_{21} \neq 0$.

c) Man bilde jetzt

$$\rho_{11} = \rho_{11}^{(0)} + \rho_{11}^{(1)} + \beta_{11}^{*}\rho_{11}^{(1)}\left(\chi + \phi\right) \tag{2.95}$$

Durch ähnliche Verfahren gewinnt man Werte für ρ_{12}, ρ_{21} und ρ_{22}.

d) Dann wendet man diese Werte an für die Gleichungen der hierarchischen Ordnung (2.72) bis (2.74), siehe unten, um dadurch die gewünschten Übergänge zu ermitteln; dies ergibt eine Menge von Werten.

e) Mit diesen Mengen von Werten geht man dann über zu Gleichungen von Typ (2.94) und ermittelt jetzt $\ln(\chi + \phi)$ bzw χ, ϕ für gewisse p_{11} und p_{21}.

f) Da p_{12} und p_{22} dann durch (2.90) bestimmt werden, ermittelt man durch Gleichungen von Typ (.89) die Interaktionswege, die die Ergebnisse mittragen.

Für die eigentliche räumliche Verteilung von Zuflüsse sind Gleichungen von Typ (2.93) maßgebend. Dies ist eine geeignete Beschreibung für die Implantierung von Ionen in eine Kette, in einen Gitter use, siehe unten für die operationelle Konzepte von NEURONICS-I.

Wir haben nicht nur erreicht, daß lokale Steuerung von Zuflüssen erreicht werden können. Sondern auch, daß in Simulierungen χ , ϕ als Parameter nicht mehr direkt auftauchen, genauso, wie Π_x , Π_y geschickt in die Diffusionskoeffizienten eingebettet wurden.

Es wurden schon bemerkt, daß wir eher mit Gleichungen von (2.46) operiren werden, siehe §2.2.5 für Begründung. In den Ableitungen von den Gleichungen (2.82), (2.88), (2.89), (2.91) und (2.94) haben aben wir dann hyperbolisch-parabolischen Gleichungen, anstatt reine parabolischen. Dadurch lassen sich die lokalisierte Steuerung von Zuflüssen als Pulsierung mit Wellenquanten beschreiben.

ANMERKUNG 2.40: Am geschicktesten ist es, mit nicht nur ρ , ρ_i ρ_{ij} usw zu operieren, sondern auch mit deren Unterteilungen, wie sie in (2.73) bis (2.78) zum Ausdruck kommen. Zwar bekommen wir vielfache Dimension, aber dafür ein 'autonomes' Rechnensystem, das nicht nur die Übergänge beschreibt, sondern uns auch erlaubt zu ermitteln, ob dies durch $\rho^{(1)}$, $\rho_i^{(1)}$, $\rho_{ij}^{(1)}$ (aufgegliedert für Schwingungs-, Rotations- und Translationsbewegungen), oder durch die Interaktionsbeiträge. Für das beschränkte Ziel dieser Arbeit genügt es, sich auf die Übergängsprobleme zu konzentrieren; in nachfolgenden Arbeiten, wird diese Annäherung in Zusammenhang mit Vereinfachung der Modellierung bestimmter molekularer Orbitale und verwandte Probleme gebracht.

Unter der Voraussetzung von APTC-5 (über die Relaxationskoeffizienten) und Lemmatta 2.33 und 2.34, sind die hier zu betrachtenden einheitlichen nichtlinearen Gleichungen von folgenden Typen:

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \eta'(\rho') \frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = D'(\rho') \nabla^2 \rho' + \frac{\partial D'}{\partial \rho'} (\nabla \rho')^2 + \phi' + \bar{\bar{f}}'(\rho') \tag{2.96}$$

ϕ' ist eine 2. nichtlineare Funktion (neben $\bar{\bar{f}}'(\rho')$); ihre Variablen sind ρ', ρ_1', ρ_2', - - -, ρ_m' , $\nabla\rho'$, $\nabla\rho_1'$, - - - - - , $\nabla\rho_m'$, e' , e_1', e_2' - - -, e_m', $\nabla e'$, $\nabla e_1'$, - - - - - $\nabla e_m'$. Sie beschreibt die Interaktionen unter den m' Komponenten. $\bar{\bar{f}}'(\rho')$ ist die nichtlineare Funktion, die analog zu (2.80), die Beiträge von Reaktionen beschreibt.

Die Gleichung (2.96) beschreibt die gesamt Materieentwicklung für die oberste Hierarchie der Abb. 2.10. Im Sinne der hier gestellten Aufgabe heißt dies: sie beschreibt das Verhalten der gesuchten Kette, verstanden als NERU; dafür gilt $\underline{m' = 9}$.
Die nächste Hierarchieebenen werden durch ähnliche Gleichungen beschrieben, und zwar:

$$\frac{\partial \rho'_{i'}}{\partial t} + \eta'_{i'}(\rho'_{i'})\frac{\partial^2 \rho'_{i'}}{\partial t^2} = D'_{i'}(\rho'_{i'})\nabla^2\rho'_{i'} + \frac{\partial D'_{i'}}{\partial \rho'_{i'}}(\nabla\rho'_{i'})^2 + \phi'_{i'} + \bar{f}'_{i'}(\rho'_{i'}) \tag{2.97}$$

dies ist eine Beschreibung der einzelnen Komponenten (von Typ der Abb. 1.1b), die die gesuchte Kette bilden. Als nächstes haben wir:

$$\frac{\partial \rho'_{i'j'}}{\partial t} + \eta'_{i'j'}(\rho'_{i'j'})\frac{\partial^2 \rho'_{i'j'}}{\partial t^2} = D'_{i'j'}(\rho'_{i'j'})\nabla^2\rho'_{i'j'} + \frac{\partial D'_{i'j'}}{\partial \rho'_{i'j'}}(\nabla\rho'_{i'j'})^2 + \phi'_{i'j'} + \bar{f}'_{i'j'}(\rho'_{i'j'}) \tag{2.98}$$

- dies beschreibt die Hierarchieebene, die durch die Zusammenfassung der Elemente ξ_1, ξ_2, η_1, η_2 in zwei Klassen entsteht.
Und schließlich haben wir

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} + \eta_{ij}(\rho_{ij})\frac{\partial^2 \rho_{ij}}{\partial t^2} = D_{ij}(\rho_{ij})\nabla^2\rho_{ij} + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \rho_{ij}}(\nabla\rho_{ij})^2 + \phi_{ij} + \bar{f}_{ij}(\rho_{ij}) \tag{2.99}$$

- die Erweiterung der Gleichung (2.80) um das Glied $\eta_{ij}(\rho_{ij})[\partial^2\rho_{ij}/\partial t^2]$ (2.99) ist eine Erweiterung der ursprünglichen Seeligschen Gleichungen um die Übergänge zwischen SW-Wellen und TW-Wellen stationäen Zuständen einheitlich zu beschreiben.

ANMERKUNG 2.41: Für das Parallelverarbeitungsprogramm, Abb. 2.11, bilden die Gleichungen (2.96) bis (2.98) die Inhalte des äussersten rechten Kasten, während die Gleichungen für ρ , ρ_i , den Gleichungen (2.97) und (2.98) ähnlich, zusammen mit den Gleichungen von Typ (2.99) die Inhalte der ersten m Kasten der Abb. 2.11 sind. Es soll daran errinert werden, daß die Hierarchie $\rho' \longleftrightarrow \{\rho'_{i'}\} \longleftrightarrow \{\rho'_{i'j'}\}$ und $\rho \longleftrightarrow \{\rho_i\} \longleftrightarrow \{\rho_{ij}\}$ durch die Zuordnungen (2.72) bis (2.74) mit einander verknüpft sind.

ANMERKUNG 2.42: Da die Gleichungen (2.80) auf der einen Seite, und (2.96) bis (2.97) auf der anderen von gleichen Typ sind, bedeutet dies auch, daß es auch Zuflüsse für ρ', $\rho'_{i'}$, $\rho'_{i'j'}$ gibt. Diese Zuflüsse haben folgende Bedeutungen: Die Zuflüsse für ρ' (das ganze) sind die gesamte Materieaddition zur gesuchten Kette mit gewünschtem Verhalten; die für $\rho'_{i'}$ entsprechen nun die Verteilung in die m' Komponenten (daher auch die Notwendigkeit der Annahme 2.39). Entsprechende Interpretation gilt für die Zuflüsse für $\rho'_{i'j'}$ ($\equiv \rho_i$). Mit anderen Wörten: wir haben also eine Hierarchie der Zuflüsse, so daß jede Ebene der Hierarchie Pumpuvorgänge darstellt. Somit ist der bestimmende Charakter des Ausgangsmodells stets bewahrt.

In der Ableitung der nichtlinearen Formulierung haben die Energierdichtefunktionen e, e_i, e_{ij} eine wichtige Rolle gespielt. Über die räumlich-zeitliche Evolution dieser Hierarchie im Bezug auf die sie tragende Materieevolution gilt allgemein:

SATZ 2.43: *Die Raum-Zeit Struktur der dynamischen Systeme für* e, e_i, e_{ij} *und* ρ, ρ_i, ρ_{ij} *sind umkehrbar veträglich, d.h. vom selben Typ.*

siehe Mbaeyi [C-19], wo auch die Einzelheiten für die Gewinnung von Gleichungen (2.80), (296) bis (2.99) zu finden ist. Wegen Abb. 2.10 macht man ähnliche Zuordnungen wie für ρ, ρ' usw in (2.72) bis (2.74). Nach Satz 2.43 sind dann $e' \longleftrightarrow \{e'_{i'}\} \longleftrightarrow \{e'_{i'j'}\}$, und $e \longleftrightarrow \{e_i\} \longleftrightarrow \{e_{ij}\}$ ($e'_{i'} \equiv e$, $e'_{i'j'} = e_i$), durch Gleichungen von Typ (2.80), (2.96) bis (2.99). Es ist daher überflüssig, diese gesondert explizit auszuführen.

ANMERKUNG 2.44: Die Energiedichtefunktionen e, e_i, e_{ij} sind nicht identisch mit der elektrischen Intensitätsfunktionen, die in der Nernst-Planckschen Formel der Elektrochemie vorkommen. Für die hier gestellte Aufgabe sind diese Dichtefunktionen folgendermassen einzubeziehen: Mit den Seeligschen Werten, die Beiträge aus Interaktionen festlegen, ermittelt man die entsprechenden Werte von e, e_i, e_{ij}. Mit dieser Ausgangsbasis lassen sich die Übergänge unter e, e_i usw mit Hilfe eines Parallelverarbeitungsschemas wie in Abb. 2.11 berechnen; wie im Falle der Materieddichtefunktionen ρ ist dies die Folge ähnlicher hierarhischer Modellierung.

Zwei weitere Überlegungen sind Bestandteile der nichtlinearen Formulierung von Evolutionsprozessen. Es sind Randwertprobleme und die sogenannte Erneuerungsgleichungen, die in Zusammenhang mit Anfangsbedingungen für gewünschte Effekte sorgen.
Die Randwertprobleme in Evolutionsprozessen werden im allgemeinen über den Weg der Variationsrechnung abgeleitet; die erforderliche Voraussetzung ist die Anwendung des Konservierungsprinzips an Stellen der stationären Zustände, siehe Mbaeyi [C-19]; diese

liefert folgende gemischte Randwertprobleme (mit Spezialisierung auf die Aufgabe hier):

$$\text{(2.100)} \qquad \begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon'}{\partial n} + \mu_1' \varepsilon' &= 0 \\ \frac{\partial \rho'}{\partial n} + \mu_2' \rho' &= 0 \end{aligned} \qquad \text{auf } \partial\Omega$$

$$\text{(2.101)} \qquad \begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon'_{i'}}{\partial n} + \mu'_{1i'} \varepsilon'_{i'} &= 0 \\ \frac{\partial \rho'_{i'}}{\partial n} + \mu'_{2i'} \rho'_{i'} &= 0 \end{aligned} \qquad \text{auf } \partial\Omega_{i'}$$

$$\text{(2.102)} \qquad \begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon'_{i'j'}}{\partial n} + \mu'_{1i'j'} \varepsilon'_{i'j'} &= 0 \\ \frac{\partial \rho'_{i'j'}}{\partial n} + \mu'_{2i'j'} \rho'_{i'j'} &= 0 \end{aligned} \qquad \text{auf } \partial\Omega_{i'j'}$$

$$\text{(2.103)} \qquad \begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial n} + \bar{\mu}_{1ij} \varepsilon_{ij} &= 0 \\ \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial n} + \bar{\mu}_{2ij} \rho_{ij} &= 0 \end{aligned} \qquad \text{auf } \partial\Omega_{ij}$$

wobei $\partial\Omega_{ij}$ weitere Unterteilung von $\partial\Omega_{i'j'}$ bedeuten, und $(\partial\cdots/\partial n)$ bezeichnet partielle Ableitung längst der Normale zu $\partial\Omega$, $\partial\Omega_{i'}$ $\partial\Omega_{i'j'}$ usw.

Entwicklung neuer Formen geschieht durch Veränderung dieser Randwerte; hierzu benötigt man Randwerte der Form:

$$\text{(2.104)} \qquad \begin{aligned} r_1'(t) \neq 0 \quad & \& \quad r_2'(t) \neq 0 \\ r'_{1i'}(t) \neq 0 \quad & \& \quad r'_{2i'}(t) \neq 0 \\ r'_{i'j'}(t) \neq 0 \quad & \& \quad r'_{2i'j'}(t) \neq 0 \\ r_{ij}(t) \neq 0 \quad & \& \quad r_{2ij}(t) \neq 0 \end{aligned}$$

Diese von Null verschiedenen Randwerten ersetzen dann die Nullen auf der rechten Seiten von (1.00) bis (2.103), wobei die linke Spalte in (2.104) such auf die e, $e_{i'}$, ..., und die rechte sich auf ρ, $\rho_{i'}$, usw beziehen. Sie sind von zwei Typen

$$(2.105)\qquad \left.\begin{matrix} r'_1(t) \\ r'_{1i'}(t) \\ r'_{1i'j'}(t) \\ r_{1ij}(t) \end{matrix}\right\} \simeq 0 \ (d.h \to 0,\ t \to +\infty) \qquad \left.\begin{matrix} r'_2(t) \\ r'_{2i'}(t) \\ r'_{2i'j'}(t) \\ r_{2ij}(t) \end{matrix}\right\} \simeq 0 \ (d.h \to 0,\ t \to +\infty)$$

definieren die zulässige Störungstheorie der stationären Zustände. Dafür genügt es präziser zu fordern:

$$(2.106)\qquad \left.\begin{matrix} (\partial r'_1(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{1i'}(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{1i'j'}(t)/\partial t) \\ (\partial r_{1ij}(t)/\partial t) \end{matrix}\right\} < 0; \qquad \left.\begin{matrix} (\partial r'_2(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{2i'}(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{2i'j'}(t)/\partial t) \\ (\partial r_{2ij}(t)/\partial t) \end{matrix}\right\} < 0$$

b) Im Gegensatz zu a) oben brauchen die Übergänge zwischen stationären Zuständen (siehe Entwicklungssysteme in §3.3 unten) Randwerte, die den Bedingungen

$$(2.107)\qquad \left.\begin{matrix} (\partial r'_1(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{1i'}(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{1i'j'}(t)/\partial t) \\ (\partial r_{1ij}(t)/\partial t) \end{matrix}\right\} > 0; \qquad \left.\begin{matrix} (\partial r'_2(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{2i'}(t)/\partial t) \\ (\partial r'_{2i'j'}(t)/\partial t) \\ (\partial r_{2ij}(t)/\partial t) \end{matrix}\right\} > 0$$

genügen.

Durch die gleichzeitige Betrachtung von Teilen von (2.106) und (2.107) ergeben sich eine Vielzahl von möglichen Zuständen bzw. Übergängen.

Die Veränderungen der Randwerte geschehen als:

a) Zuzufügung bzw Abzug von Materie von/nach aussen (Umgebung) - aktiver Materieaustausch mit der Umgebung mittels Transportphänomens, oder

b) äussere Einwirkung von phänomenologische Effekte (Warme, elektrische, magnetische Felder, Druck) , oder

c) Kombinationen von a) und b) oben (allerdings abwechselnd, in auf sequentielle Weise, siehe '5-State-Automat'-Prinzip).

Im Falle des Leitbilds, Nervenfaser, gilt im allgemein die 2. Alternative, die allerdings bezüglich der Entstehung des Aktionspotentials nach der 3. Alternative operationell abläuft.

Ergänzende Betrachtungen über diese Randwertprobleme erfolgen in Kapitel 3, während die angesprochenen Erneuerungsprobleme auf Kapitel 5, §5.2 verschoben wird. Da ihr Weglassen hier die weitere Entwicklungen nicht beeinträchtigen. Wie wir in Kapitel 5 sehen werden, sind sie mit dem Problemen von Anfangswerten eng verzahmt.

2.4: Elemente der Laserphänomenologie

In der einleitenden Erläuterung der Ergebnisse dieser Arbeit, wurde der Laser erwähnt; dies soll hier weiter erläutert werden, und in Zusammenhang mit optischer Informationsverarbeitung gebracht werden. (Optische Informationsverarbeitung umschreibt Informationsprozesse - Datenaufnahme, -Speicherung und -Widergabe -, die auf der Grundlage von oprischen Prozessen erfolgen). Diese sind notwendige Voraussetzung für die Spezialisierung im nächsten Abschnitt (§.2.5).

2.4.1: GRUNDPRINZIP

Laser ('Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation') ist angeregte kohärente (Licht-)Strahlung, die durch Populationsinversion in einem atomaren bzw. molekularen System bewirkt wird. Hierzu sind folgende Voraussetzungen erforderlich:

a) Atomare bzw. molekulare Aggregate, die anregbar sind ; (siehe §.2.5.1 für entsprechende Definition der Anregbarkeit).
b) Atomare bzw. molekulare Systeme, die mindestens 3 oder mehr Energieniveaus besitzen, siehe Svelto [E-59] , Seite 9-11 für Begründung.
c) Atomare bzw. molekulare Systeme mit der Eigenschaft, daß Populationsverschiebung (d.h. positiver Populationsüberschuß) zwischen Energieniveaus geschaffen werden kann.
d) Atomare bzw. molekulare Komplexe, die für anregende Strahlung und Laserstrahlung durchlässig sind.

Atomare und molekulare Systeme, die diesen Voraussetzungen genügen, werden LASERMATERIAL genannt.

Abb. 2.40 ist eine Darstellung der möglichen Strahlungsverhaltnisse zwischen 2 Energieniveaus, siehe Svelto [E-59] :

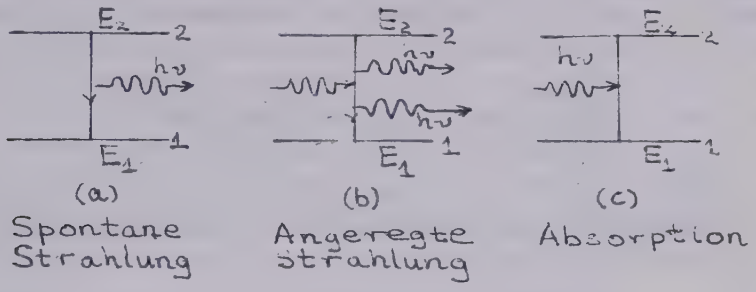


Abb. 2.40 Schematische Darstellung der 3 möglichen Interaktionsprozesse zwischen 2 Energieniveaus

Betrachten wir zwei Energieniveaus in einem Material; es seien E_1 und E_2 die entsprechenden Energien und, N_1 , N_2 die entsprechenden Besatzungszahlen. Betrachte eine Portion des Materials in einer -Richtung unter Einfluß einer einfallender Strahlung, Abb. 2.41 (Svelto [E-59]):

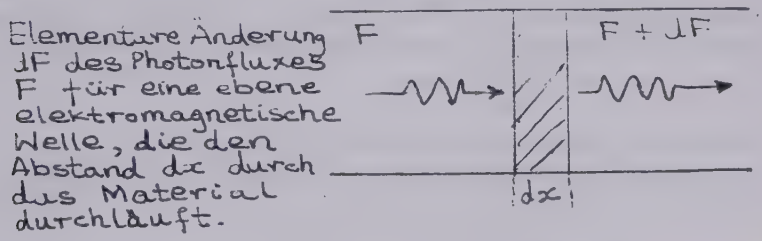


Abb. 2.41

Die elemenater Änderung am Flux F (angeregte Strahlung und Absorption) genügt der Bedingung

$$dF = \sigma F (N_2 - N_1)\, dx \tag{2.108}$$

$\sigma \triangleq$ Übergangsquerschnitt ('Transition Cross Section')

(siehe Svelto [E-59]), so daß

$$\frac{dF}{dx} < 0 \quad \text{falls} \quad N_2 < N_1 \tag{2.109}$$

$$\frac{dF}{dx} > 0 \quad -\!\!\shortparallel\!\!- \quad N_2 > N_1$$

Das Material verhält sich im Falle von (2.109a) wie ein Absorptionsmedium, und als (Populations-)Verstarkungsmedium im 2. Fall. Aber im Falle des thermodynamischen Gleichgewichts (stationären Zustnds) gilt nach Boltzmannscher Statistik die Formel:

$$\frac{N_2^{(e)}}{N_1^{(e)}} = \exp\left[-\frac{(E_2 - E_1)}{kT}\right] \tag{2.110}$$

wobei $N_1^{(e)}$, $N_2^{(e)}$ die entsprechenden Populationen sind (beim thermodynamischen Gleichgewicht), k ist die Boltzmannsche Konstante, und T ist absolute Temperatur des Materials. Daraus folgt

$$N_2^{(e)} < N_1^{(e)} \quad \forall \; E_2 > E_1 \tag{2.111}$$

beim thermodynamischen Gleichgewicht.
Offenbar ist (2.109a) eine Umkehrung von (2.111); sie wird daher Populationsinversion bezeichnet, da $N_2 - N_1 > 0$ von (2.109b) ein umgekehrtes Vorzeichen zu $N_2^{(e)} - N_1^{(e)} < 0$ des thermodynamischen Gleichgewichtszustands hat. Materialien mit der Fähigkeit zur Populationsinversion werden *aktive Materialien* genannt; Lasermaterialien sind alle aktive Materialien. Aktive chemische Systeme werden allerdings anregbare Systeme genannt.

Das am häufigsten angewandte Prinzip zur Lasererzeugung ist das sogenannte optische Pumpen: Ein Lasermaterial wird zwischen zwei hochpolierten Spiegeln eingeordnet, Abb. 2.42

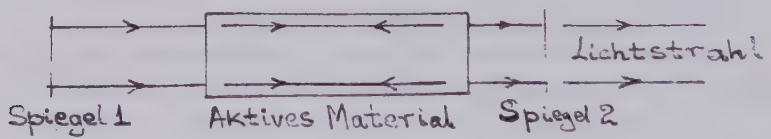


Abb. 2.42 Schema für einen Laser

Zum Prinzip:

a) Allgemeines: Ein atomares Aggregat im angeregten Zustand, das mit einer einfallender Lichtstrahl zusammenstoßt, kann zur Strahlung angeregt werden (siehe Abb. 2.40b oben). Stimmt die Phase dieser angerenten Strahlung mir der der anregenden Lichtstrahl überein, so wird die Strahlung eine Verstarkung der eingefallenen Lichtstrahl. Eine multiplikative Verstrkung dieses Phänomens führt zu einer hochenergetischen kohärenten Lichtstrahl (einer Lichtlawine).

b) Zu Abb. 2.42: Es wird angenommen, daß das aktive Material (d.h. seine molekulare Mikrostruktur) im angeregten Zustand ist. Zur Strahlung kommt es, wenn eine Lichtstrahl durch den Spiegel M_2 mit dem aktiven Material zusammenstoßt. Die ständige Reflektion zwischen den Spiegeln M_1 (undurchlässig) und M_2 (durchlässig) erzeugt den in a) gerade oben genannten multiplikativen Effekt, wodurch eine Lichtlawine aufgebaut wird.

Hierzu Steele [E-58] , Svelto [E-59] , Weber et al [N-20] , wo auch andere alternative, aber äquivalente, Anordnungen zu finden sind.

2.4.2: LASERTYPEN

Gegenwärtig gibt es vier grösee Klassen von Lasertypen:

a) Der rein physikalische Laser - Lasern ausslieβlich auf rein physikalischer Basis (ohne jeglicher chemische Aktionen). Beispiele für diese Klasse sind: Ruby und Neodymimum Lasers, einige gasdynamische Laser (auf der Basis der rein thermischen Verbrennung von Gasen); zu dieser Klasse gehört auch ein Teil der Farbstofflaser, falls die charakteristische Farbenveränderungen die Folge von optischen Prozessen auf rein physikalischer Basis ist.

b) Chemische Laser (siehe §2.4.1) arbeiten mittels einer energetischen Umwandlung, die durch reine chemische Kinetik hervorgerufen wird. Beispiele sind Farbstofflaser (energetische Umwandlungen als Folge einer reinen chemischen Kinetik sind durch Farbenveränderungen erkennbar, siehe z. B. Gross et al [E-21] , Kompa [E-35]), gas dynamische Laser - thermische Verbrennungen in Gasdynamik als Folge von Gasenvermischungen, die von chemischer Kinetik begleitet wird -, Chemoluminenz bzw. Chemoflourezenz (Aufleuchtung als Maß für energetische Umwandlungen).
Abb. 2.43 und Abb. 2.44 sind Beispiele für Anordnungen für chemische Laser, siehe z. B. Gross et [E-21] S. 445 und 329: (Abb. 2.43 und Abb. 2.44 befinden sich auf Seite 112).

c) Eine 3. grösse Klasse bilden die sogenannten Flüssigkeits-Laser, deren Anordnung in Abb. 2.45 (Seite 112) zu sehen ist, siehe Lempicki et al [E-36]. In dieser Klasse sind auch Farbenveränderungen manchmal Beobachtungsmittel, so daß diese etwa verwandt ist mit der Klasse der Farbstofflaser.

d) Halbleiterlaser bzw. Festkörperlaser: Lasern in dieser Klasse

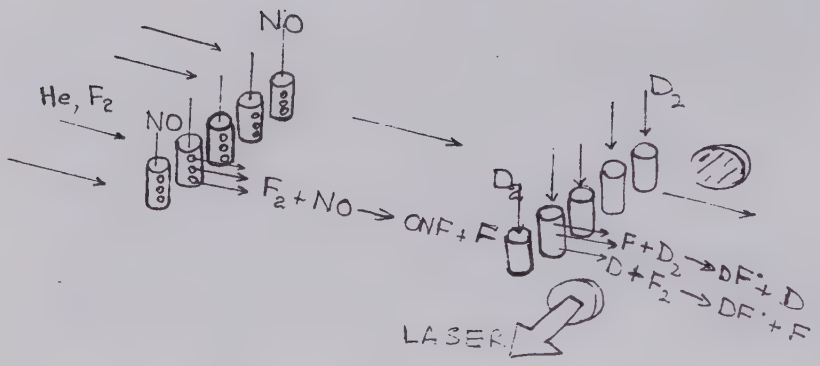


Abb. 2.43 Reaktionsschema für HF, DF, HF-CO_2 und DF-CO_2 rein chemische Laser.

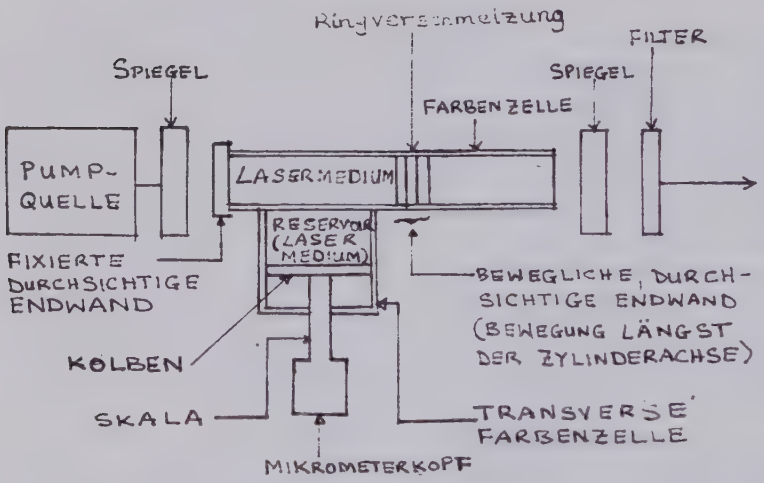


Abb. 2.44 Abstimmbarer bzw Einstellbarer Farbstofflaser

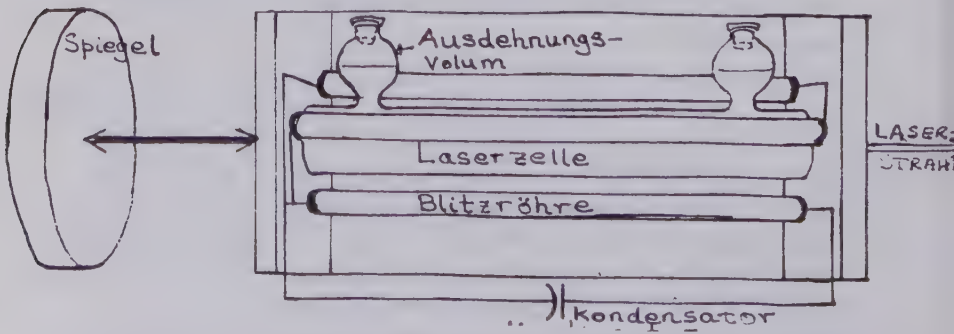


Abb. 2.45 Flüssigkeitslaser nach Lempicki et al [E-36]

erfordert Kombinationen von physikalischen und chemischen Aspekten; sie erfogt auf der Grundlage von Auf- und Entladung von meßbaren Konzentrationen von Teilchen (Quanten). Dabei ist es häufig notwendig, die Ionenkonzentrationen zu transportieren. Die Erzeugung der Ionenkonzentrationen bildet die chemische Seite dieser Klasse der Lasermaterialen, während die notwendige begleitende Transporterscheinung die physikalische darstellt, siehe §2.4.4 für weitere Erläuterungen.

Sektion E der Literaturangaben am Ende dieser Arbeit ist ein Querschnitt durch die Laserliteratur; schnelle einführende Überblicke über Lasertypen geben insbesondere Ben-Shaul et al [E-7] Gross et al [E-21] , Köpf [E-34] , Lengyel [E-37] , Moore [E-41] , Schäfer [E-51] , Steele [E-58] , Arechi et al [N-1].

2.4.3 BEMERKUNGEN ÜBER DIE GLEICHUNGEN DER LASERPROZESSE

Die Gleichungen der Laserprozesse sind vom selben Typus wie das Gleichungssystem (1.7) bzw. (1.9), nur mit dem einen Unterschied, es wird mit Populationszahlen operiert anstatt Konzentrationen, siehe Steele [E-58] . Wir wollen uns hier deshlab nur auf die Aufzeichnung der Beziehungen zu hierarchischen Modellen beschränken.

Als erstes ist zu bemerken: Beim Weglassen von Diffusion und Voraussetzung von zero Relaxationskoeffizienten, redurieren sich die Gleichungen (2.28), (2.46) und (2.99) auf gewöhnliche DGLen; unter Berücksichtigung von (2.79), (2.81) usw lässt es sich leicht nachprüfen, daß

$$\frac{d\rho_{ij}}{dt} = \bar{\bar{f}}_{ij}(\rho_{ij}) \qquad (2.112)$$

mit dem ursprünglichen Seeligschen Modell zusammenfällt, wobei die Zuflußparameter χ , ϕ dynamisch definiert sind, wie in §2.3.3 gezeigt wurde.

Die Beziehung zwischen Laserprozessen und einem hierarchischen Modell ist leicht nachzuweisen. Betrachten wir ein Lasermaterial mit m Energieniveaus, E_1, ... , E_m , Abb. 2.46 (auf Seite 114). Wir ordnen diesen Energieniveaus die Populationen (Besetzungszahlen) N_1, N_2 , ..., N_m . Offenbar ist die Gesamtpopulation die Summe dieser Teilpopulationen; gleiche Schluß-

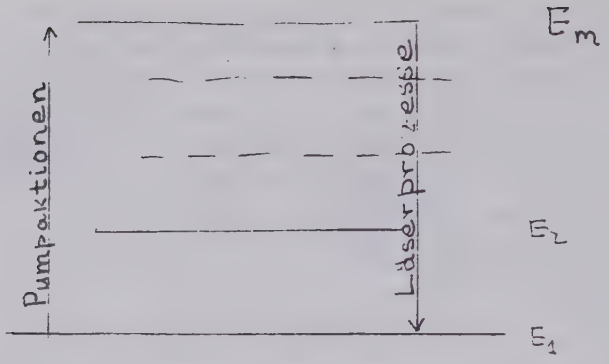


Abb. 2.46

folgerung gilt nicht für die energetischen Teile, wie bald unten erörtert wird. Wie wir in Zusammenhang mit Abb. 2.20 (bz.w Abb. 2.21) gesehn haben, brauchen die Energieniveaus nicht Ein-Punkt-Menge (d.h. Stellen mit nur einzigen Werten) zu sein, sondern möglichewerseise auch Mehr-Punkt-Menge (d.h. Stellen mit mehreren, aber durch Äquivalenzreltionen verbundenen Werten). Die Unterteilung von E_1 , ... , E_m und N_1 , ... , N_m ergibt die unterste Hierarchieebene, wie wir sie in §2.2.1 eingeführt haben. Die Behauptung, die Gesamtpopulation sei $N_1 + ... + N_m$ ist nur richtig, solange der Prozess nicht durch Schaffung bzw. Vernichtung von Materie begleitet wird, z.B. durch chemische Reaktionen. Für diesen Fall sind neue Massenkonservierungsgesetzte notwendig, und neue Formel für die Gesamtpopulation wie sie durch die Formel (2.76) bis (2.78) zum Ausdruck kommen.

Laserprozesse sind hochenergetische Prozesse, die durch Dissipationseffekte (siehe Anhang §A1 für Definition der Dissipation) begleitet werden siehe Airey [E-2] , Chester [E-11] , Cool [E-14] , Gross et al [E-21] , Hofland et al [E-25] , Karady [E-30] , und entsprechende Bücher/Monogrphien über Laser (Sektion E der Literaturverzeichnisse dieser Arbeit). Daher sind die Gesamtenergien nicht notwendigerweise lineare Summe der Teilenergien. Daher auch die Notwendigkeit, die Energierelationen über den Weg von Θ , Θ_i , Θ_{ij} zu modellieren, und die energetischen Beziehungen zwischen den Niveaus durch nichtlineare Interaktionsfunktionen wie in (2.8) und (2.9) zu definieren.
Mittels Θ , Θ_i , Θ_{ij} haben wir gesehen, daß die Evolution

von Laserprozessen eindeutig definiert werden kann als die enge Koppelung von Energie- und Populationsdichten. Daneben zeigen die Formel folgendes: die klassiche Formulierung für Laserprozesse (siehe z. B. Steele [E-58] und Svelto [E-59]) ist ein Sonderfall der nichtlinearen Formulierung - konstante Volumen, die auf 1 normiert sind. Aber gerade die Volumeneffekte (d.h. Raumeffekte) sind einige der Hauptprobleme bezüglich der Erzeugung von Laserstabilität usw.

2.4.4 LASDUNGSTRANSPORTBAUELEMENT (CTD - 'CHARGE TRANSFER DEVICE') Ladungstransportbauelemente, CTD oder auch CCD ('Charge Coupled Devices') genannt, sind spezielle Halbleiternetze. Diese Elemente werden für verschiedene Informationsverarbeitungsaufgaben eingesetzt, sowohl digital als auch analog, siehe Barbe et al [E-4] und [E-5] . Der Hauptgedanke der digitalen Verarbeitung mit CTD/CCD ist wie folgt: Information wird durch Ladungspakete - Quanten von Ladungen - erzeugt; jedes Ladungspaket wird als eine einheitliche Haufung bewegt, d.h. transportiert. Das Grundelement für CTD/CCD ist dem Transistor sehr verwandt, Abb. 2.47, siehe Goetzberger et al [E-22]:

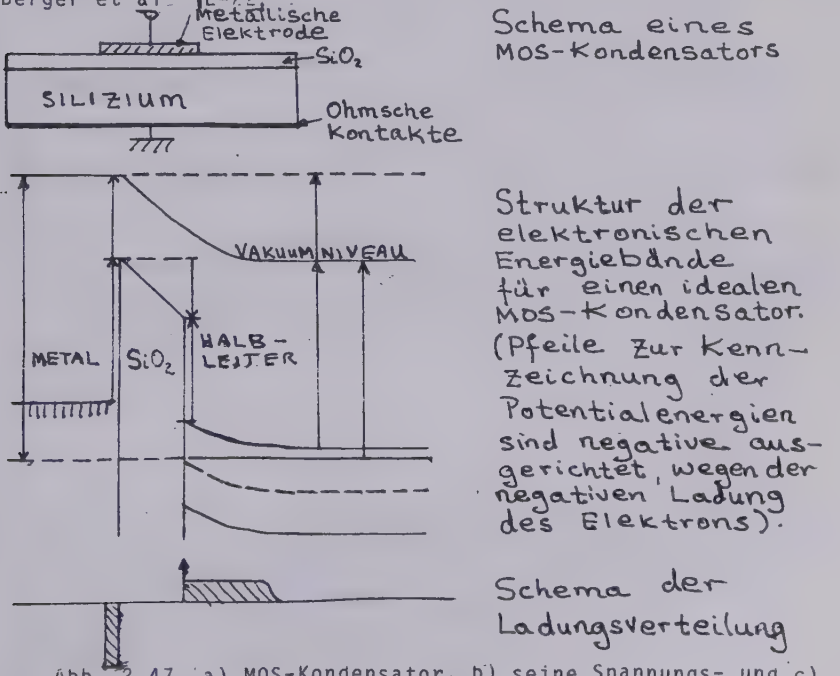


Abb. 2.47 a) MOS-Kondensator, b) seine Spannungs- und c) seine räumliche Ladungsverteilung.

Wie unten bildlich gezeigt wird, ergibt sich der Vergleich mit dem Transsistor aus folgenden Zuordnungen:

Metale	≙	Strahler ('Ermitter')
Silicium	≙	Kollektor

Abb. 2.48 unten ist der Transistorvergleich für Abb. 2.47, siehe Grivet [A-19] :

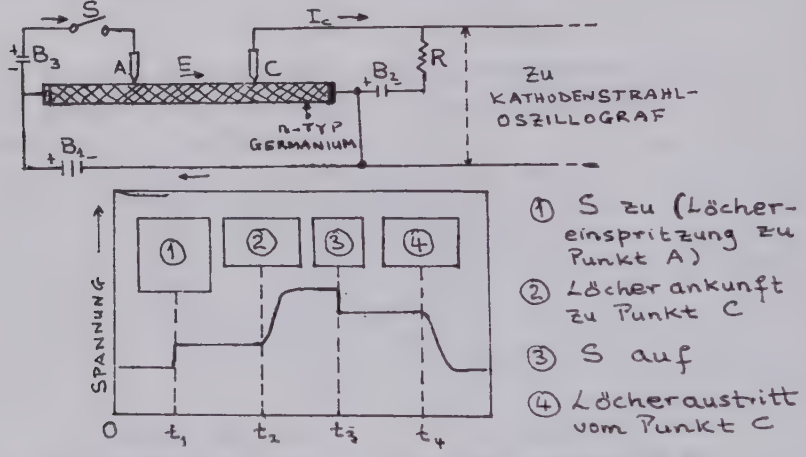


Abb. 2.48

(Achtung: Das untere Bild muß um 90^0 gedreht werden, bevor es richtig mit dem unteren Bild von Abb. 2.47 verglichen werden kann).

Bevor wir über die Betrachtung der funktionellen Aspekte zur Erzeugung von CCD/CTD-ähnlichen Gebilden, soll die Beziehungen diese Elemente (d.h. CCD/CTD) zu der hier gestellten Aufgabe klas umrissen werden. Abb. 2.49 ist ein Grundelement der Transistor-Schaltung:

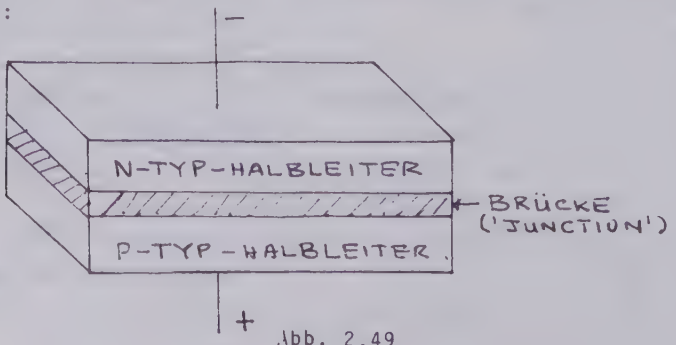


Abb. 2.49

Kombiniert man Abb. 2.49 mit den oberen Bildern in Abb. 2.47 und Abb. 2.48, und Abb. 1.1b, so ergeben sich folgende unmittelbare Analoge, Abb. 2.50:

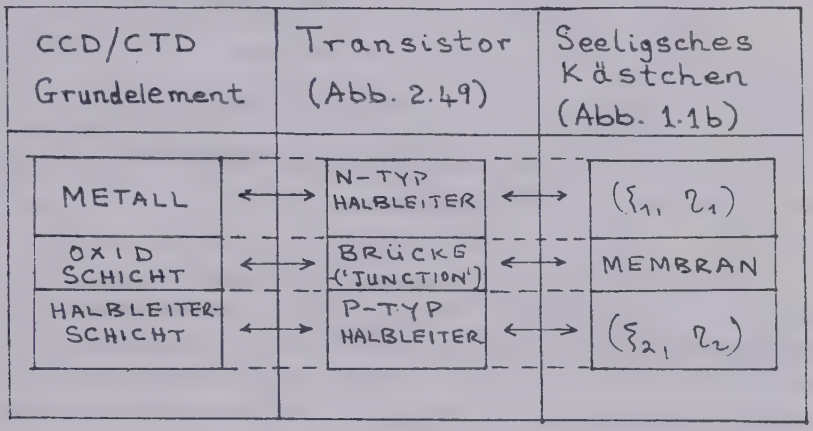


Abb. 2.50

Durch diese Analoge ist der Vergleich zwischen CCD/CTD und der gesuchten Kette Seeligscher Oszillatoren offenkundig, wie unten mit Hilfe von Abbildungen noch offenkundiger wird.

Wird das obere Bild in Abb. 2.47 unter Spannung gesetzt, so sammelt sich eine Ladungsmenge in einem Potentialtopf, der sich am SiO_2-Si Interaktionsfläche bildet, Abb. 2.51:

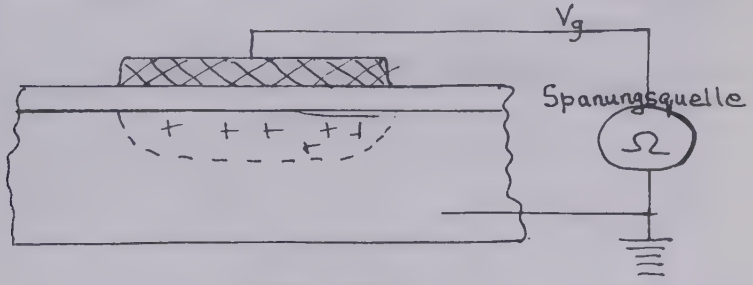


Abb. 1.51

Ladungsmenge werden in unmittelbarer Umgebung der Trennfläche angesammelt, wie auf Kondensatorenplatten; (daher wird dieses Element häufig auch das MOS-Kondensator genannt, siehe Barbe et al [E-5], Sze [E-60]).

Betrachten wir nun die Koppelung von zwei MOS-Kondensatoren nach der Abb. 2.52:

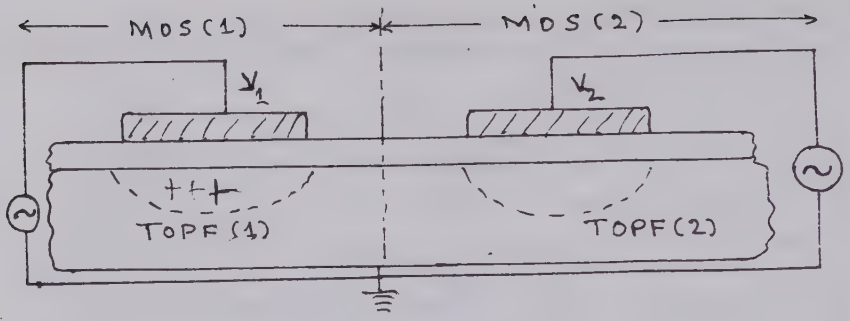


Abb. 2.52

Wird MOS(1) unter Spannung gesetzt, so bekommen wir Abb. 2.51 für diesen Teil von Abb. 2.52. Wird die Spannung auf MOS(1) langsam herabgesetzt, während MOS(2) unter Spannung gesetzt wird, so wird die Ladungsmenge von TOPF(1) ins TOPF(2) geleert. Mit anderen Wörten: Anordnungen wie in Abb. 2.52 ermöglichen die gezielte Bewegung (Transport) von Ladungsmengen mittels Koppelung von MOS-Kondensatoren. Dies ist die Grundlage für CCD/CTD - gezielter Transport von Ladungsquanten mittels Steuerung der Potentialtopfe dadurch, daß eine gekoppelte Kette von MOS-Kondensatoren selektiv im diskreten Zeitraum unter Spannung gesetzt wird.
Durch geeignete Verallgemeinerung von Abb. 2.52 erhält man Anordnungen wie in Abb. 2.53:

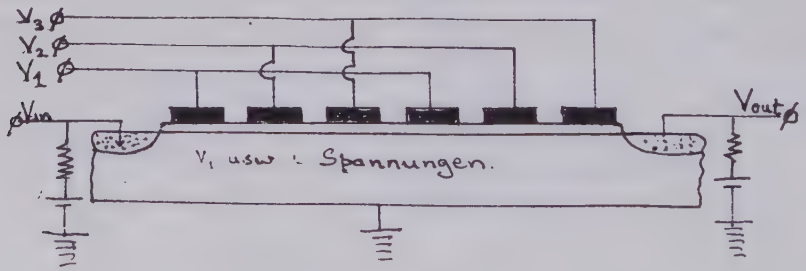


Abb. 2.53

Formel haben wir:

DEFINITION 2.45: *Ein CCD/CTD ist ein Schieberegister (für Ladungsquanten). Es besteht aus drei kooperierenden Teilen:*

a) ein Eingabeteil, in dem Ladungsquanten erzeugt werden, und dessen Ein- und Ausschaltung die Schiebung eines Ladungsquantums in 1. Potentialtopf bewirkt;

b) eine Schiebesektion, in der eine progressive Fortschiebung von Ladungsquanten vorgenommen wird durch entspre-

chende Manipulation der Spannung bzw. Potential an der $Si-SiO_2$ Interaktionsfläche;

c) *ein Ausgabeteil, eine umgekehrte Diode im Vergleich zum Eingabeteil, dessen Spannung sich ändert, wenn ein Ladungsquantum ihn erreicht.*

2.4.5 CTD UND INFORMATIONSVERARBEITUNG - DAS SCHREIBEN UND LESEN EINES CTD

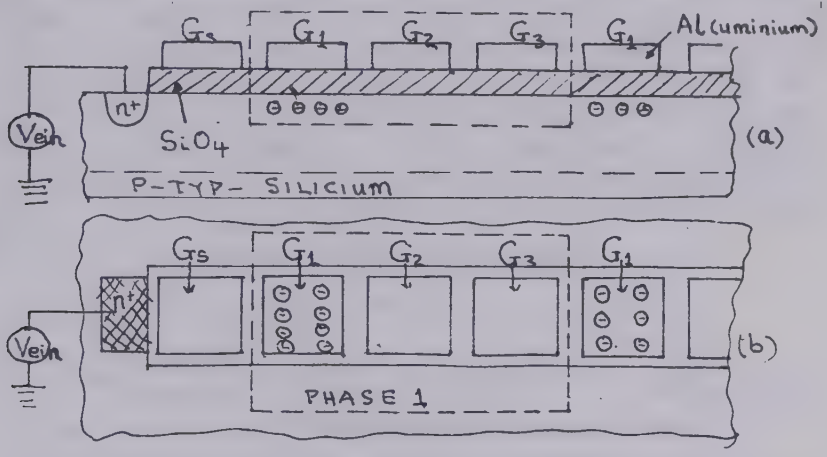
Ladungsmenge und deren Verarbeitung können als Informationseinheit bzw dem -Fluß dienen, wenn zwei Eigenschaften gewahrleistet sind:

a) Ladungsmenge sind stets isoliert identifizierbar, damit sie als Meßeinheiten zur Verfügung stehen können.

b) Sie müssen stets ganzheitlich verschoben werden.

In der nichtlinearen Theorie sind beide Eingenschaften durch Einführung der Konzepte (1) der 'saltatorischen Diffusion' - Gebietslokalisierung der Diffusion, und (2) der Diffusionsströme als Verschiebung von lokalen Strömen gesichert, siehe Mbaeyi [C-19] auch für die verwandten Gradienteneigenschaften.

Eine weitere Einrichtung zur Sicherung isolierbarer Ladungsmenge ist die Zusammenfassung in Einheiten)'Blocks'), wie in Abb. 2.54:



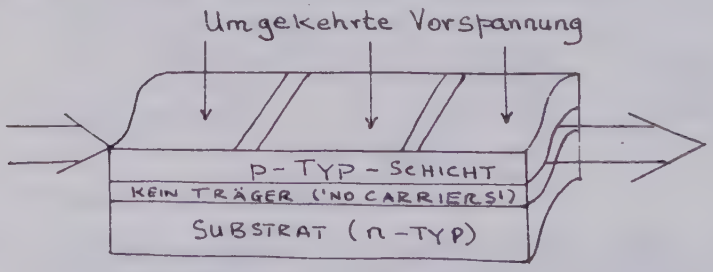
a) Querschnitt eines CTD mit n^+-Diode für Eingabe G_s - Sperre (für Isolierung von Ladungsquanten)

1. Phase ; (b) Blick von oben

Abb. 2.54

G_1 , G_2 , G_3 entsprechen den in Definition 2.45 spezifizierten drei Teilen, und definieren eine Phase (ein Stadium) des CTD. Jeder Phase werden daher mindestens 3 Zeitintervalle zugeordnet. Erst wenn eine Ladungsmenge an eine neue Phase des CTD übergegangen ist, kann sie erneut besetzt werden. Auf dieser Weise wird für die Isolierung der Ladungsquanten gesorgt.
Information ist nur bewahrt, solange die Ladungsquanten zusammengehalten werden können. Mit der Zeit kommt es zu Ladungsverluste (durch Diffusion) da die Ladungsquanten wie Diffusionsquellen wirken. Information kann daher nur für kurze Zeit bewahrt werden. Mit anderen Wörten: CCD/CTD ermöglichen nur STM; dabei haben wir nur das Schreiben (WOM - 'Write only Memory', insbesondere für die Fälle wo CCD/CTD als Meß- bzw. Regelungsgeräte eingesetzt werden) oder das Lesen (ROM - 'Read only Memory'). Der operative Modus ist eindeutig NRZ. Die 2 stabilen Zustände sind Löcher und Ladungsquanten.

nstatt Spannung (für das WOM oder ROM) mit den Ladungsquanten zu erzeugen (Abb. 2.53), kann man mit ihnen Lichtstrahlung erzeugen. Hierzu: Rekombination von Löchern und Elektronen, die in der Brücke ('Junction', in der Funktion eines 'Gleichrichters' ('Rectifier')) statfindet, wird vorausgesetzt. Besteht die Brücke aus einem aktiven Material (z.B. Lasermaterial), so kann die energetische Umwandlung der Rekombination zur Lichtstrahlung aus dem Bereich der Brücke führen, siehe Sze [E-60] . CCD/CTD werden dann Halbleiterlaser; Abb. 2.55, siehe Nishizawa und Olsuka [E-45] ist ein Beispiel solcher Halbleiterlaser:



Vorspannung: Verstärker/Absorption
Umgekehrte Vorspannung: verlustlose Übertragung

Abb. 2.55

Für eine einheitliche Einführung in Halbleiterlaser verweisen wir auf Moorehead [E-42] ; dort ist eine Zusammenstellung der geeigneten Elemente (bekannt oder vermutet) zu finden.
Mit Halbleiterlaser haben wir CCD/CTD, die die Voraussetzung für optische Informationsverarbeitung erfüllen. Für die hier gestellte Aufgabe werden die entsprechenden Beziehungen zum Nervenproblem in §2.5.2 erfolgen.

2.5 Eine 1-dimensionale Kette Seeligscher Oszillatoren als Bausteine Chemischer Laser

Die Erörterungen von §2.4 sollen nun auf chemische Systeme spezialisiert werden. Wie bereits erwähnt wurde, zeigt sich die Anregungsenergie eines Moleküls in der Form von Wärme oder Licht, wann das angeregte Molekül zum Grundzustand zurückkehrt, siehe z. B. Kauzmann [A-34] . Chemische Lasern besteht darin daß Populationsinversion mit Hilfe von chemiscker Kinetik als Quelle der Anregungsenergie erzeugt werden. Hierzu sind exotherme Reaktionen erforderlich; (exotherme Reaktionen sind durch begleitetende Wärmeproduktion charakterisiert). Dabei sind es vor allem die Schwingungsenergieen, die zur Strahlung führen können (bei geeignetem Relaxationsprozess). Populationsinversion mit Hilfe chemischer Kinetik wird als chemisches Pumpen bezeichnet, siehe Seelig [A-61] , Ben-Shaul et al [E-7] , Chester [E-11] , Gross et al [E-21] Köpf [E-34] , Kompa [E-35] , Moore [E-41] . Die wichtigsten drei Sorten von chemischem Pumpen sind in Abb. 2.56 (auf Seite 122) zu sehen, (Kompa [E-35]).
Beispiel chemischer Laser sind folgene Reaktionen:

$$Cl_2 + h\nu \longrightarrow 2Cl$$

$$Cl + H_2 \longrightarrow HCl\,(v=0) + H \qquad \Delta H = 1\ \text{kcal/mol}$$

$$H + Cl_2 \longrightarrow HCl\,(v=3,2,1) + HCl \qquad \Delta H = -45\ \text{kcal/mol}$$

siehe Moore [E-41] , und

$$\text{Photolysis}: \quad CF_3I + h\nu_{(2700\text{Å})} \longrightarrow CF_3 + I(^2P_{1/2})$$

$$\text{Laser}: \quad I(^2P_{1/2}) \longrightarrow I(^2P_{3/2}) + h\nu_{(1350\text{Å})}$$

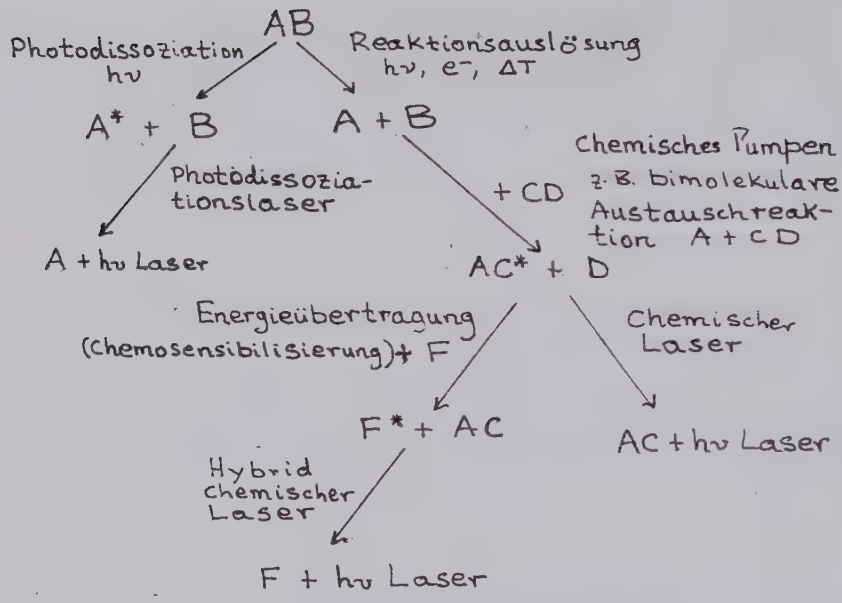


Abb. 2.56 (aus Kompa [E-35])

siehe Kompa [E-35] ; dieser Prozess hat viele Zwischenzustände, wie wie in Abb. 2.57 dargestellt wird:

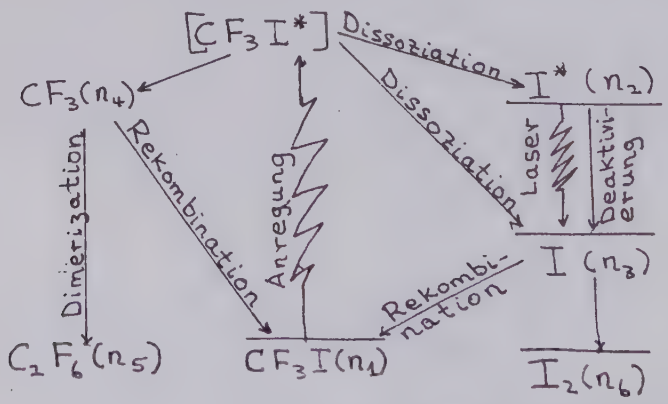


Abb. 2.57 Schema für photochemischen Jodlaser

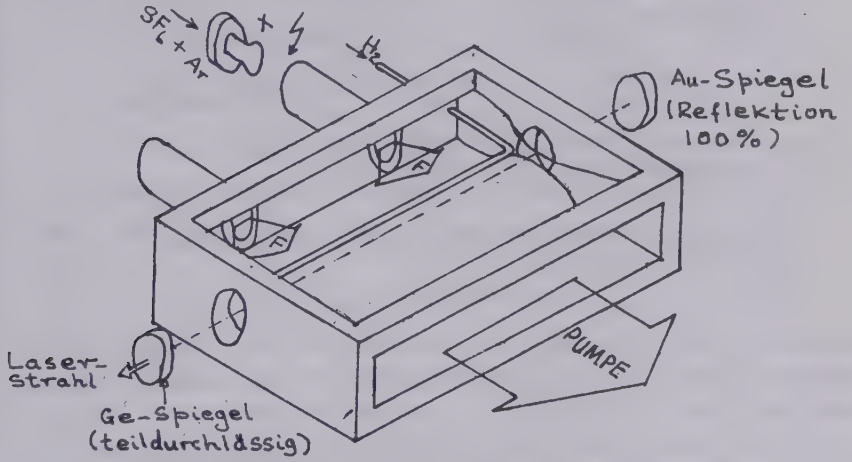
(NB: Obwohl Abb. 2.57 ein 5 Niveau-System zeigt, als Bestätigung des '5-State-Automat'-Prinzips, hat sie allergdings keine Rolle in der Entstehung desKonzepts gepielt).

Über die Erzeugung chemischer Lasern bemerkt Köpf [E-34] Seite 34 - 35:

'Die Erzeugung von Laserlicht mit einem chemischen Laser efordert mehrere Verfahrensschritte, wie auch an dem in Abb. 1.20 skizzierten HF-Dauerstrichlaser zu erkenne ist:

- Aufbereitung der Gase einschlisslich der Dissoziation der Ausgangsmoleküle. Diese entsteht hier durch eine 7-kW-Gasentladung, in der in einm Trägergas Fluoratome von SF_6 abgetrennt werden. Daneben werden auch thermische, chemische und Photo-Dissoziationsprozesse verwendet.
- Mischung der Gase und Reaktion in einem Laserresonator. Der Wasserstoff tritt hier aus einem Düsenkamm nahe der Resonnatorachse aus.
- Abpumpen der häufig giften Reaktionsprodukte. Durch starke Pumpen und entsprechende Ausbildung der Saugquerschnitt wird dier erreicht, daß das Gas das Reaktionsvolumen mit hoher Geschwindigkeit (200 m/s) durchsetzt und sich dort nur 50µs aufhält. Viele chemische Laser arbeiten deshalb auch mit Überschallströmungen und Reaktionsvolumina in Form von Überschalldüsen....'

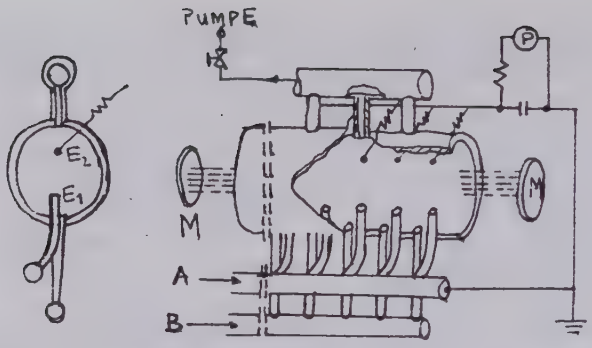
Die Abbildung, auf die in diesem Zitat verwiesen wird, ist Abb. 2.58 in dieser Arbeit:



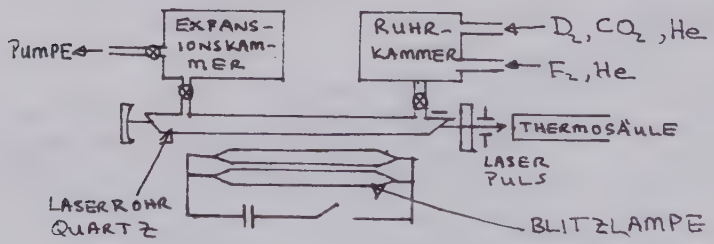
Aufbau eines chemischen Dauerstrichlasers
Abb. 2.58

Beispiele andere Anordnungen sind in Abb. 2.59 (auf Seite 124) zu sehen.

Am bekanntesten sind pulsierte (chemische) Laser (Laserlicht in Formen von Impulsen). Demgegenüber haben die CW-Laser ('Continuous-Wave' Laser ≡ Dauerstrichlaser) - Lasern in Formen von konitinuerlichen Lichtstrahl. Dies führt zu Dauerstrichlasern bei denen die Pumpumechanismen kontinuerlich aufrechterhalten werden, so daß



a) Chemischer Laser, mit Chemikalienfluß quer zu Resonatoraxis: M — Spiegel M↔M ∥ Resonatoraxis; E_1, E_2 – Elektrode (als Eingaberohr für Reagenten durch A, B), Kompd [E-35]



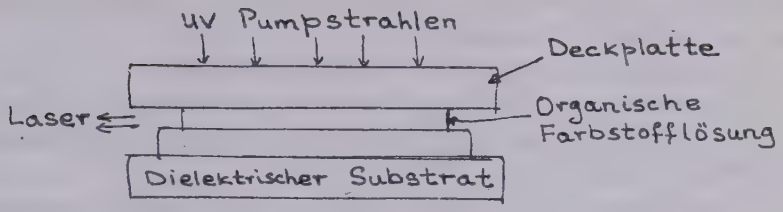
b) Pulsierter DF-CO_2 Chemischer Laser (Gross & Bott [E-21])

Abb. 2.59

konstante Lichtleitungen erbracht werden können. Dauerstrichtlaser lassen sich mit Hilfe von Reaktionsdiffusionssystemen erzeugen, siehe Hofland et al [E-25] . In diesem Zusammenhang wollen wir besonders unterstreichen, daß Hofland et al auch nichtlineare einführen, und dabei auch veränderliche Diffusionskoeffizienten berücksichtigen, in Übereinstimmung mi den bisherigen Eröterungen hier.

Um wieder an die hier gestellte Aufgabe schließen zu können, betracten wir eine Art 'chemisches MOS-Kondensators' bzw chemische Halbleterlaser, Abb. 2.60 (Seite 125):

Die Anordnungen in Abb. 2.60 sind Abb. 2.49 ähnlich. Durch die Analoge in Abb. 2.50 haben wir die Beziehung der hier gestellten Aufgabe zu chemischen Lasern.



Querschnitt eines verteilten Feedback für einen seitlich gekoppelten Laser

Abb. 2.60a) aus Schäfer [N-17] bzw. [E-51]

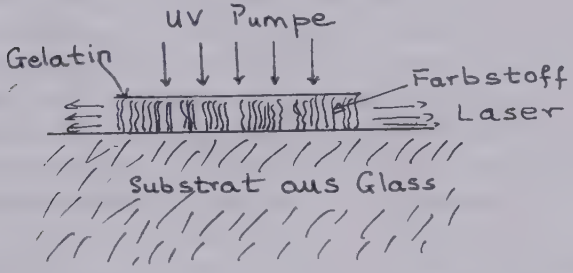
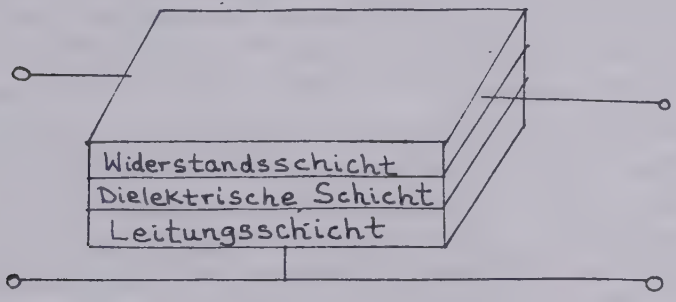


Abb. 2.60b) Querschnitt eines verteilten Feedback-systems betstehend aus Gelatinfarbstoff (Shank E-55) aufgetragen auf einen Substrat aus Glass

ANMERKUNG 2.46: Abb. 2.61 ist ein Beispiel einer verteilten Schaltung:



Beispiel eines Widerstand-Kondensator-Netzes

Abb. 2.61

In chemischen Systemen kann es auch passieren, daß Reaktionen lokal beginnen und sich allmählich übers ganze System ausdehnen. Das heißt: Chemische Systeme müssen bezüglich chemischer Kinetik

Das heißt: Chemische Systeme müssen bezüglich chemischer Kinetik zwei Eigenschaften besitzen:

a) sie müssen mindesten lokal anregbar sein.

b) Sie müssen die räumliche Ausdehnung der Anregbarkeit zulassen.

(Ausnahme sind explosionsartige Kinetik, bei der alle Teile spontan und fast gleichzeitig erfasst werden).

Da Anregbarkeit (bzw. Reizbarkeit) eine wesentliche Voraussetzung für chmeisches Lasern ist, wollen wir diesen Begriff präzisieren: Die gängige Definition, siehe Karfunkel [A-32] , basiert of Systemen mit Wellen von konstanten Profilen (CPW - Constant Profile Waves). Im Faller einer Nervenfaser (Hilfsbeispiel dieser Arbeit trifft diese Bedingung nur am 'Threshold' (Zustand des Aktionspotentials, 'Conservation Threshold nach vorausgegangen Definitionen in dieser Arbeit). Aber bekanntlich ist eine Nervenfaser unter dem 'Threshold' als anregbar buw reizbar anzusehen (ansonsten wäre der Zustand des 'Trigger-Threshold' nicht möglich). Diese Lücke lässt eine Unklarheit zu, nämlich eine unscharfe Differenzierung zwischen dem Prinzip der Anregbarkeit, und dem allgemeinen Konzept von Wirkung-Folge in der klassischen rationellen Mechanik.

Zur Klärung dieser Differenzen wird der Begriff ERREGUNGSTRÄGER bzw REIZTRÄGER ('IMPULSE CARRIER') eingeführt:

DEFINITION 2.47: *Besitzen die Gleichungen für das $(e-p)$-Hierarchie, als Modell für ein chemisches System verstanden, Wellenlösungen, dann ist der Prozess, welcher der $(e-p)$-Hierarchie zugrunde liegt, ein ERRUNGUNGSTRÄGER.*

DEFINITION 2-48: *Ein gnzes Medium eines Prozesses, verstanden als das durch den Prozess eingenommene Gebiet in $\mathbb{R}^3$, ist nur dann anregbar, wenn es ein Erregungsträger ist, mit Wellenlösungen, die 'Solitary Waves', SOWA-Wellen, darstellen.*

Die obigen Definitionen implizieren: Teil eines Prozesses kann ein Erregungsträger sein, ohne das der ganze Prozess es sein muss. Mit anderen Wörten, eine ausbreitende Wellenlösung erfasst nicht das ganze Medium (als reine Konsequenz von Wirkung-Folge Prinzip); dieses Stadium eines Prozesses ist rein dissipative, siehe Anhang §A1. Dies ist zum Beispiel der Fall mit der Nervenfaser unter dem Threshold.

Durch Definition 2.48 wird die auf CPW-Wellen basiert Definition der Anregbarkeit, siehe Karfunkel [A-32] ., zugleich erweitert und verallgemeinert; dies ist nun übertragbar auf beliebige Prozesse.

Die Entwicklung eines Prozesses vom Erregungsträger (Teil eines

Prozesses) zu einem anregbaren Medium (ganzer Prozess) impliziert, daß sich die auslösenden Reiz mittels Weitergabe als Obertragungsart durchs ganze Medium ausbreiten. Mit anderen Wörten: Der Übergang vom Erregungsträger ins anregbare Medium geschieht mittels einer diskreten Übertragungsform, die bestimmten sequentiellen Operationen vergleichbar ist; in die Art der sequentiellen Übertragungsoperationen wird ergänzend in Kapitel 3 eingegangen.

2.5.2 EINE 1-DIMENSIONALE KETTE SEELIGSCHER OSZILLATOREN IM SPIEGEL DER NERVENFASER

Eine entscheidende Eigenschaft jedes Informationsverarbeitungselement ist: *Es muss Information diskret (sowohl zeitlich als auch quantitativ) und unterscheidbar aufnehmen, ggf speichern, wiedergeben können.*

Die CCD/CTDs erfüllen diese Bedingungen mit ihren ladungsquanten, die als bestimmter Spannungswert (bei gewöhnlichen CCDs) oder als bestimmtes Lichtquantum (bei Halbleiterlasern) umgesetzt werden. Zwar geben die Anordnungen in Abb. 2.60 bestimmte Laserlichtquanten her (bei geeigneter Konstruktion allerdings). Aber eine Reihe davon ermöglichen keine Schieberegisterfunktion. Will man trotzdem damit Informationsverarbeitung erreichen, so müssen zwei Fragen geklärt sein:

A) WIE GROSS MUSS EINE REIHE VON ANORDNUNGEN WIE IN ABB. 2.60 BZW. ABB. 1.1B WEGEN ABB. 2.50 SEIN, UM EIN GEEIGNETER BAUSTEIN ZU SEIN FÜR EIN ANDERES NETZ, DAS DER INFORMATIONSVERARBEITUNGSBEDÜRFNISSE GENÜGT ?

B) WIE SIEHT DIESE NETZ AUS ?

NEURONICS-I (§2.5.3) ist die Antwort auf die 2. Frage, in dem die Nervenfaser als Hilfsbeispiel für die 1. Frage herangezogen wird. Hierzu müssen folgende Fragen geklärt werden:

1) ERFÜLLT DAS VERHALTEN EINER GEREIZTEN NERVENFASER DIE VORAUSSETZUNG FÜR CHEMISCHES LASERPHÄNOMEN ?

2) SIND DIE NERVENTEILE, DIE EINE NERVENAKTION TRAGEN MIT DEM CCD/CTD/HALBLEITERLASER VERGLEICHBAR ?

Beide Fragen werden bejaht: Betrachten wir Abb 2.62 (auf Seite 128); diese Abbildung ist eine Vereinfachung von Abb. 2.33.

Folgende Erläuterungen beziehen sich auf Abb. 2.62:

a) Die Konzentrationen von K^+ , Na^+ , und Cl^- - die Hauptakteuren der Nervenaktionen - sind beim Vergleich von den Gebieten R_0 und R_4 ($\equiv R_{-4}$) invertiert, siehe

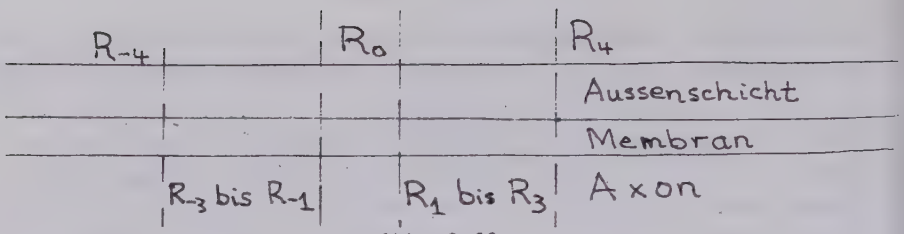


Abb. 2.62

Noback et al [A-48].

b) Das Aktionspotential ist durch Wärmeeffkte (d.h. exotherme Prozesse) begleitet. Diese Prozesse sind Reaktionen chemischer Natur, siehe Noback et al [A-48], und auch die zahlreichen Literaturhinweise in Mbaeyi [A-41].

Somit ist die 1. Frage oben erledigt.

c) Durch folgende Analoge, sind Vergleiche mit CCD/CTD zulässig:

R_0	=	gefülltes Loch
R_1 bis R_4	=	Die Schaffung und eventuelle Füllung eines benachbarten Lochs durch örtliche Veränderung der angesetzen Spannung (Abb. 2.53 und Abb. 2.54)
R_{-3} bis R_{-1}	=	Entleerung des gefüllten Lochs R_0 mit Bereitstellung für das Nachfüllen.
R_4 und R_{-4}	=	Abb. 2.49 ohne angesetze Spannung.

d) Die Vergleiche vervöllständigen wir mit folgenden Zuordnungen:

Membran in Abb. 2.62	$\triangleq$	Aktive Brücke ('Active Junction') in Abb. 2.49

Daraus erfolgt folgender Analog in Anlehnung an Halbleiterlaser:

Membranpotential (Aktionspotential einer Nervenfaser)	$\triangleq$	Lichtstrahl bei Halbleiterlaser

Eine Voraussetzung hier ist allerdings:

ANNAHME 2.49: *Die Nervenmembran ist ein dynamisches chemisches Kontinuum.*

Somit sind alle Voraussetzungen geschaffen für Vergleich der gesuchten Seeligschen Kette mit einer Portion der Nervenfaser; wir setzen

EINE SEELIGSCHE KETTE ALS GRUNDELMENT FÜR EINE INFORMATIONSVERARBEITUNGS-EINHEIT ≙ *NERU*

Bekanntlich ist die Eigenschaft des Nervensystems, ein 1-dimensionaler Leiter zu sein, nur durch die synaptische Modulation gewährleistet; (diese Frage, die zur Konstruktion von NEURONICS-II - Fortsetzung von NEURONICS-I - führt, wird nirgends hier erörtert). Ohne die Synapse kann eine am Punkt A (Abb. 2.63) gereizte Nervenfaser

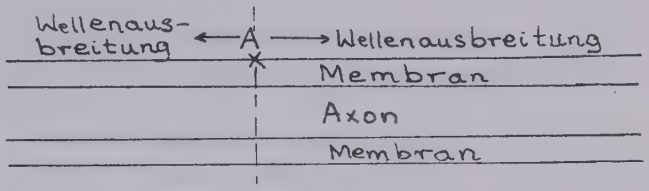


Abb. 2.63

sowohl nach links als auch nach rechts leiten. Trotzdem kann mit NERU eine Schaltung konstruiert werden, dessen Ausgabeseite nur eine Richtung (d.h. 1-dimensional) hat, siehe nächsten Abschnitt.

Ein Bild der Nervenaktion nach dem '5-State-Automat'-Prinzip sieht folgendermassen aus, Abb. 2.64

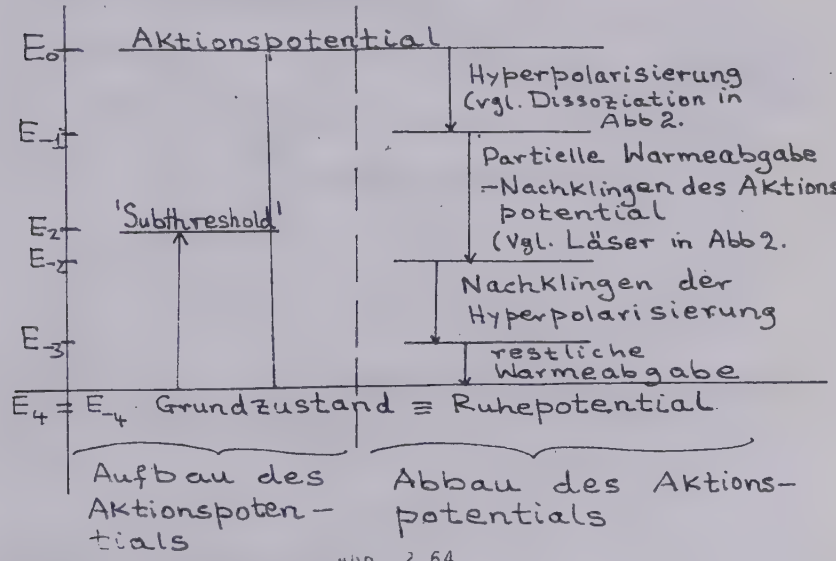


ABB. 2.64

2.5.3 NEURONICS-I: MODELL EINES ELEMENTAREN IC CHIPS

Mit NEURONICS-I wird ein 'Chip', eine Art integrierte Schaltung (IC - 'Integrated Circuits') vorgeschlagen, das sich für die wesentlichen Aspekte der Informationsverarbeitung (Aufnahme, Speicherung und Wiedergabe) eignet. Wie wir durch die Konstruktion sehen werden, ist eine Folge von Seeligschen Kompartmenten (wie in Abb. 1.2), der dem NERU gleichgesetzt wird, nicht sehr optimal für eine Kombination der genannten Aufgaben.

NEURONICS-I ist der elektronischen Schaltung nachgeahmt, die Information mit einer festgelegten Zeitverzögerung verarbeitet, und die mit Hilfe der Zeitverzögerung die Informationseinheiten diskret trennt.

Im Zusammenhang mit der Erörterung von FLIP-FLOP (§2.2.5) haben die elektronische Schaltung eingeführt (Abb. 2.23), die 2 stabile stationäre Zustände besitzt. Ersetzt man die Widerstände R_1 und R_2 in Abb. 2.23 durch Kondensatoren, so entsteht ein Flip-Flop auch, aber mit zwei total instabilen stationären Zuständen, Abb. 2.65, siehe Jacobowitz [E-28] :

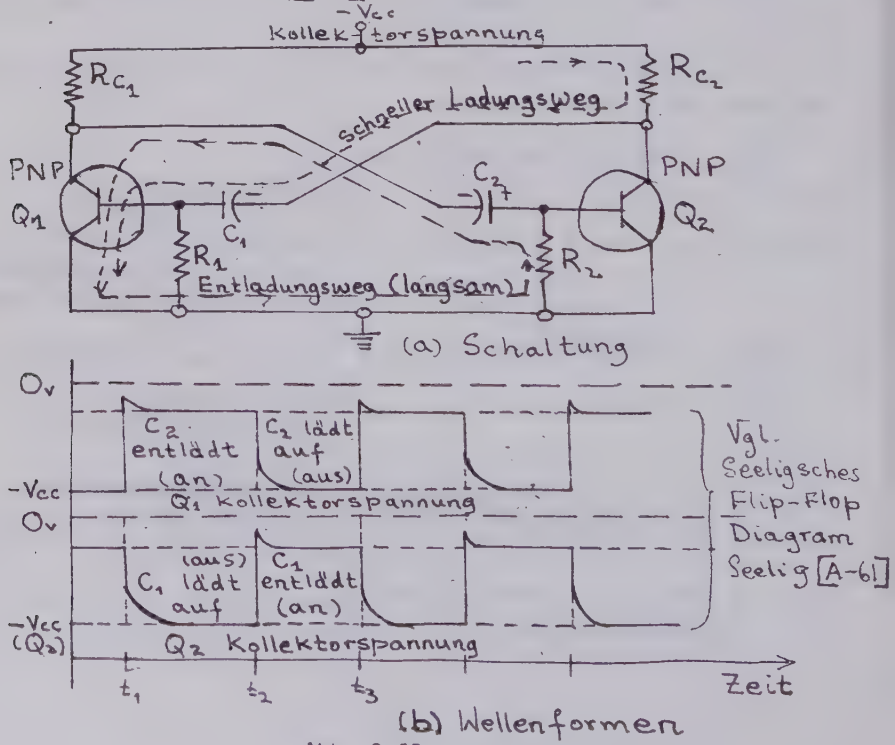


Abb. 2.65

Diese Schaltung ist eine Bestätigung der Feststellung in §2.2.1, daß Diffusion nicht ohne weiteres ein Mittel der Materieanhäufung sein kann; (die Aufladung der Kondensatorenplatten wird auch von Diffusion abhängig). Daher auch die Notwendigkeit, das Seeligsche Reaktions-Diffusions-Schema zu ergänzen.
Kombiniert man Abb. 2.23 und Abb. 2.65 in dem nur ein Widerstand für einen Kondensator (oder umgekehrt) ausgetauscht wird, so entsteht eine elektronische Schaltung mit einem stabilem und einem instabilen stationären Zustand; sie besitzt die Eigenschaft, daß sie Impulse mit einer gewissen Zeitverzögerung verarbeitet, die eindeutig von Null verschieden ist. Das Heißt: Es gibt ein positives Zeitinterval zwischen Eingabe- und Ausgabeimpuls, Abb. 2.66, siehe Jacobowitz [E-28] :

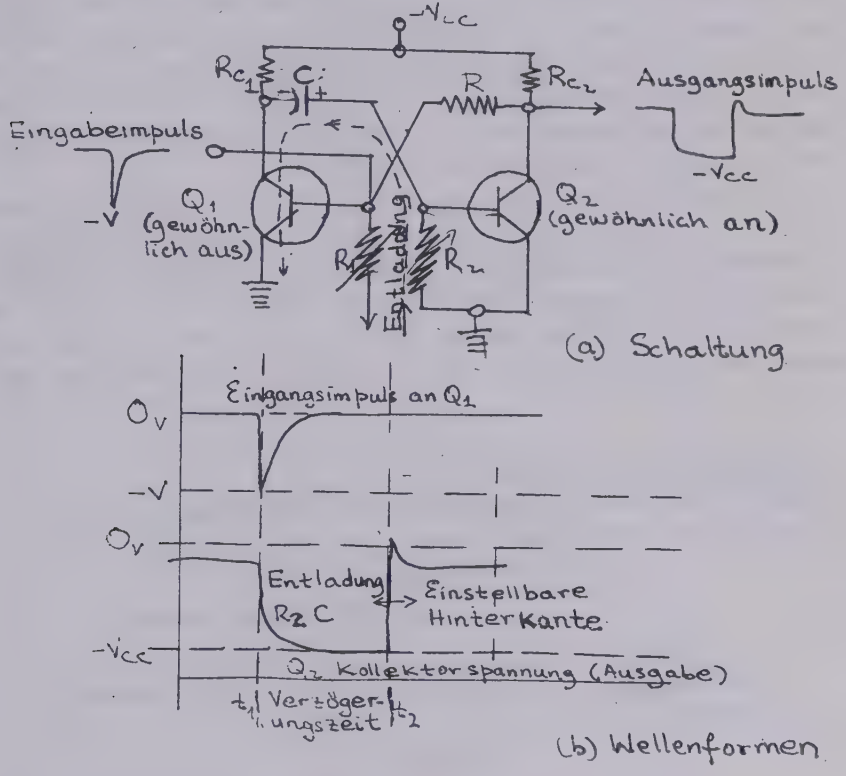


Abb. 2.66

Mit Hilfe des Widerstandes ist es gelingen eine zeitliche Regelung des Kondensatorsverhaltens (und indirekt des Diffusionsverhalten

von Ladungsmengen) zu erreichen. Es ist daher möglich, zwei Eingabeimpulse diskret zu trennen; auf diese Weise wird ein digitales Scieberegister erzeugt, siehe Jacobowitz [E-28], Seite 159 -170

Zur Anknüpfung and die hier gestellte Aufgabe bemerken wir: das Nervenpotential ist ein Diffusionsprozess; zwei einander folgende Nervenaktionspotentiale sind zeitlich durch ein sogenanntes Refraktärphänomen als Erzeuger einer Refraktierzeit ($\equiv$ Zeitverzögerung) eindeutig getrennt, siehe Noback et al [A-48] .
Das Refrktärphänomen ist eine speziele Eigenschaft anregbarer Systeme, über die Relaxationsprozesse hinaus. Während Relaxationszeiten die Intervalle für die Rückkehr von Systemen in Bereiche der stationären Zustände darstellen, sind Refraktärzeiten die Zeitintervalle, die die entsprechenden Systeme brauchen, um erneut anregbar zu sein nach Rückkehr zum stationären Zustand. Somit ist die Refraktätzeit grösser oder gleich Relxationszeit; es bedeutet auch: Am Ende der Relaxationszeit besitzt ein anregbares System eine kurze 'tote' Periode bezüglich der Anregbarkeit.
Für das Leitbidl dieser Aufgabe - Nervenfaser - wird die Refraktärzeit als Funtion der Relaxationszeit definiert mit Hilfe des zeitoptimalen Steuerungsproblems, siehe Mbaeyi [A-20] und [A-41] (dabei wird die gesamte Zeit für ein Aktionspotential in die Refrktärzeit für den Übergang von R_0 bis R_{-4}, Abb. 2.33 und verwandte Abbildungen, und die Zeit für den R_4 bis R_0 Übergang zerlegt).

KONSTRUKTION VON NEURONICS-I:

a) Zwei in Berührung stehende Ringe von Nervenfasern ergeben analoges Ergebnis wie in Abb. 2.65

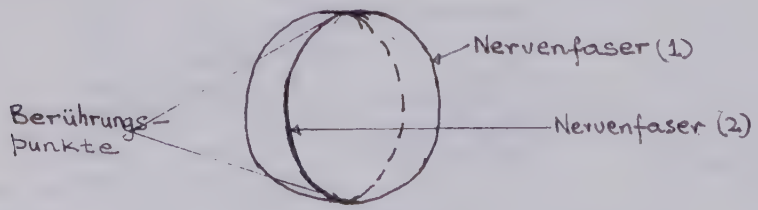


Abb. 2.67

Die Anregung einer der Nervenfaser führt zu übertragener Anregung an den Berührungspunkten. Aber die laufenden Wellen auf den Nervenbesitzen wechselnde Richtungen.

b) Mit Hilfe lokalisierter Diffusionswellen (von lokalisierten Diffusionsströmen getragen) zwingt man, Abb. 2.67 eine Richtung auf, und zwar mittels folgender integrierten Verbindungen, Abb. 2.68

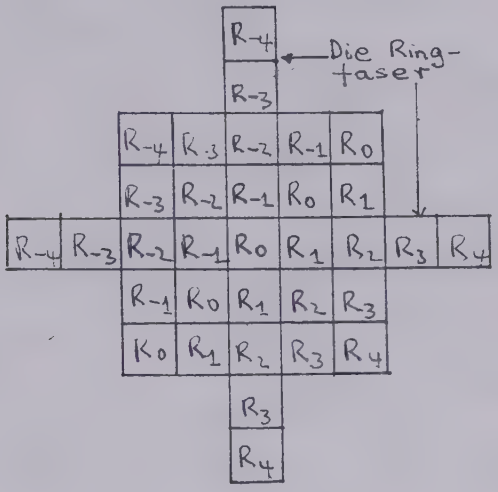


Abb. 2.68

Unter Berücksichtigung von Abb. 2.33 ergibt sich folgende Richttungsfestlegungen, Abb. 2.69

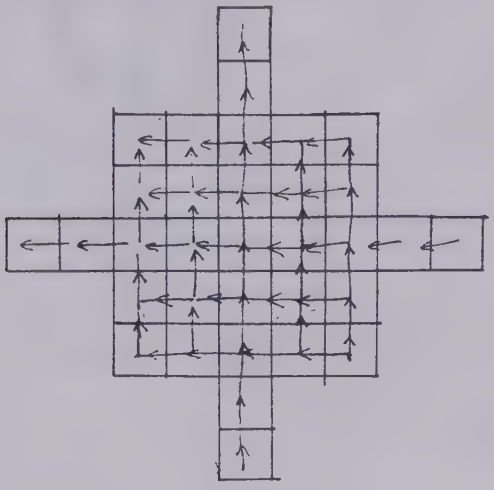


Abb. 2.69

Offenkundig wird die wechselnde Richtungen der Wellen (Abb. 2.67) durch die Kanalisierungen in Abb. 2.69 aufgehoben.

Abb. 2.70 zeigt ein 'Chip', das Abb. 2.68 gerescht wird:

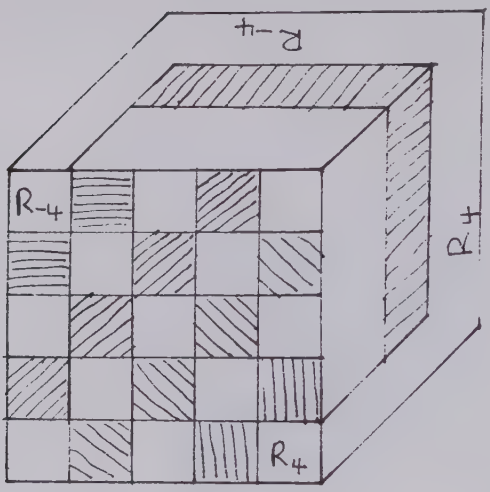


Abb. 2.70

Die gewünschten oberen und seitlichen Details sind in Abb. 2.71 zu sehen:

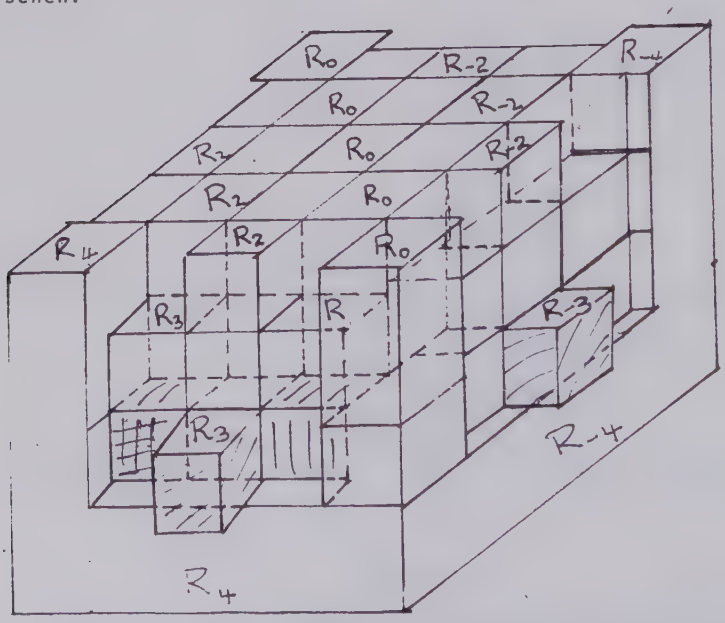


Abb. 2.71

Ein Querschnitt längst die Ringe hat folgende Form:

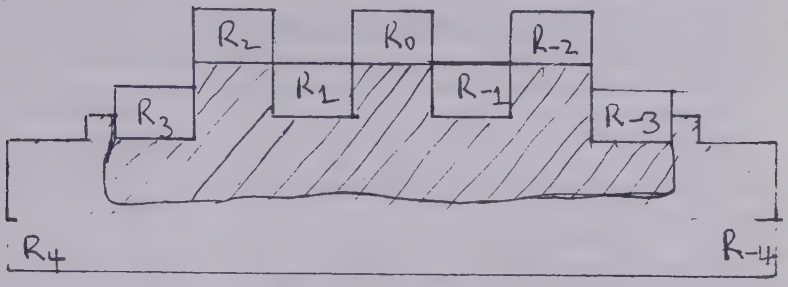


Abb. 2.72

Die 1- dimensionale Orientierung des Wellenlaufs auf dem Chip lässt sich durch folgende Hierarchie ablesen, Abb. 2.73:

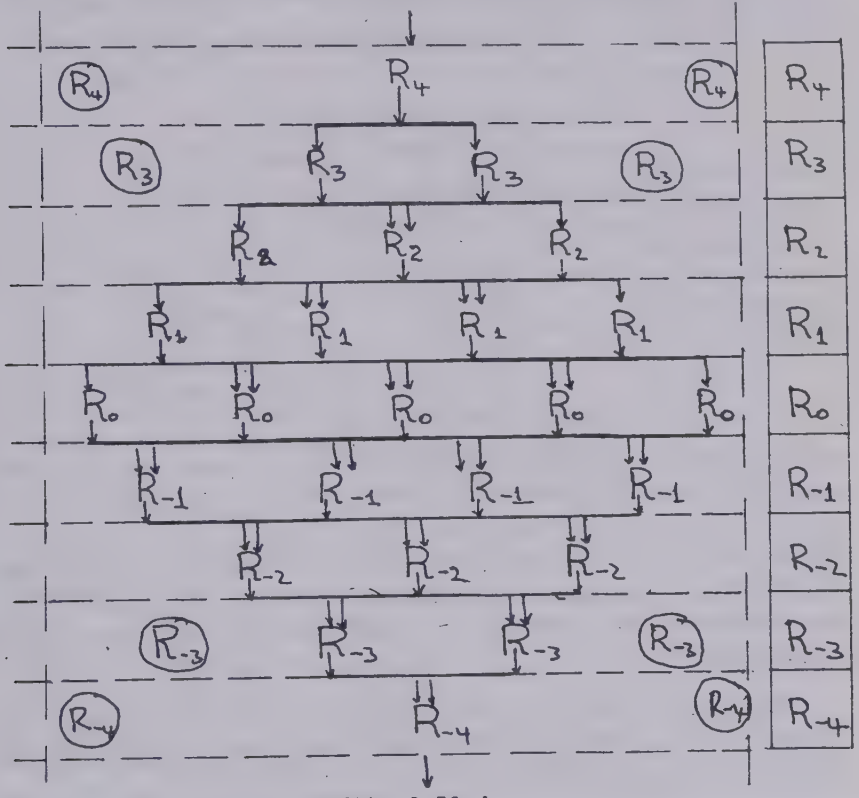


Abb. 2.73

Um diesen Chip zu simulieren ist eine Modellierung nicht erforderlich; das eingeführte hierarchische Modell überträgt sich selbst

rekursiv, durch geeignete Anpassung der Funktionen.
Unterberücksichtigung von Abb. 2.37a hat der vorgeschlagener Chip im Sinne des Seeligschen Reaktionsschemas folgende Form:

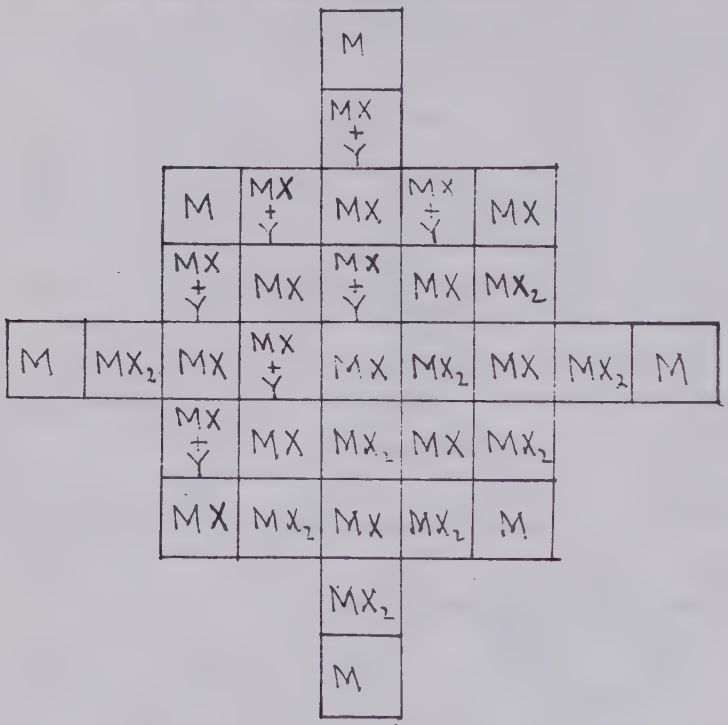


Abb. 2.74

Weitere Beschäftigung mit diesem Vorschlag ergeben sich in nachfolgenden Abschnitten, einmal üner entsprechende Reaktionen, und dann über das Schreiben und Lesen mit höher Dichte.
Der Abschnitt schliesst mit einer Reihe von Vergleichen mit vorgeschlagenem Chip: Abb. 2.75 und Abb. 2.76 sind Vergleiche für Abb. 2.67 und Abb. 2.69; Abb. 2.75 und Abb. 2.77 befinden sich auf Seite 137.

In diesem Zusammhang wird auch auf die Überlegungen bezüglich stoichiometirsche Lasermaterialien hingewiesen, Abb. 2.77 (Seite 138), siehe Danielmayer [E-15] :

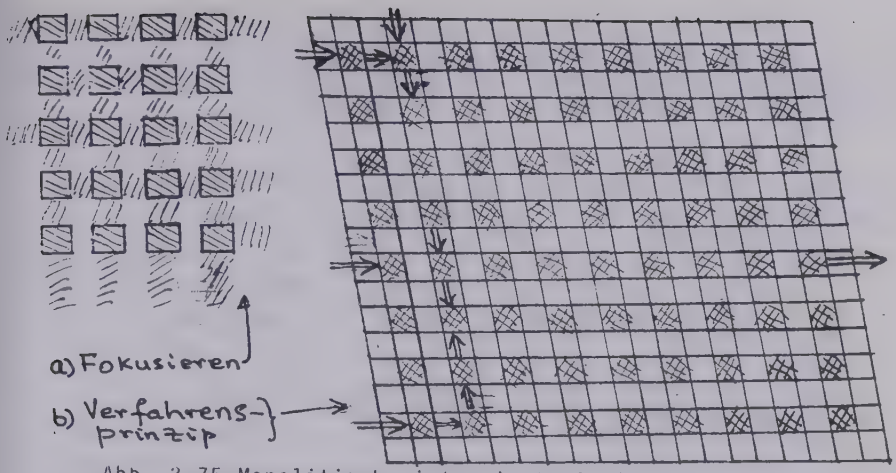
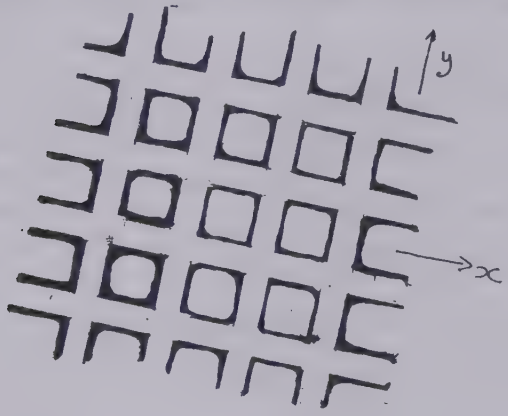


Abb. 2.75 Monolitische integrierte Optik



Schematische Darstellung eines Metall-gitters in der optischen Mikroelektronik.

Abb. 2.76

Der Vergleich für Abb. 2.71 und Abb. 2.70 ist Abb. 2.78, siehe Abraham [E-1] ; Abb. 2.78 ist auf Seite 138.
Die Art der Profile, die Abb. 2.71 gerecht wird - Trennung der Gebiete R_{-4} bis R_4 - wird durch Abb. 2.79 (auf Seite 138) illustriert, siehe Peng et al [E-47] :

Die hier vorgeschlagene Chip-Struktur zeigt sich dekungsgleich mit gängigen Überlegungen und Richtungen der Forschung über diese Frage.

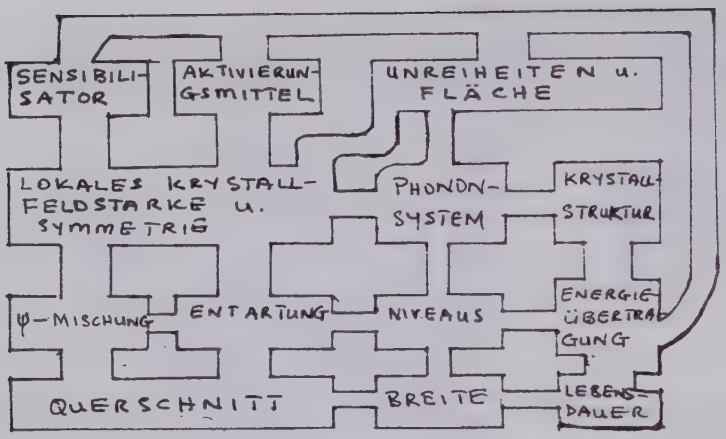


Abb. 2.77 Systemstheoretische Darstellung eines stoichiometrische Lasermaterial; (kein unabhängige Elemente)

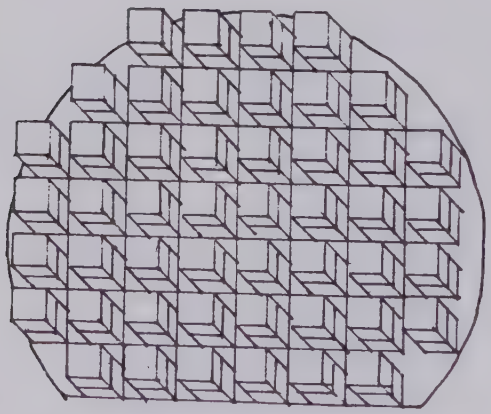


Abb. 2.78 Monolitische Lawinenmatrix

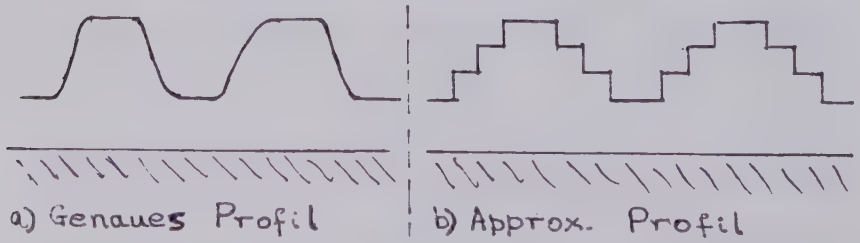


Abb. 2.79 Ober Analysis von Gittern mit schiefen Rändern

2.5.4 CHEMISCHE REAKTIONSKINETIK ALS INFORMATIONSTRÄGER

Ladungsübertragungskinetik ('Charge Transfer Reactions') ist eine Art der chemischen Reaktionskinetik, die als Informationsträger dienen kann. Beispiele sind:

$$A^+ + A \longrightarrow A + A^+ \quad \text{(symmetrische Reaktion)}$$

$$A^+ + B \longrightarrow B^+ + A \quad \text{(asymmetrische Reaktion)}$$

siehe Bowers et al [C-2].

Beispiele für exotheme Reaktionen sind:

$$H_2^+ + He \longrightarrow HeH^+ + .H$$

$$H_2^+ + Ne \longrightarrow NeH^+ + .H$$

siehe auch Bowers et al [C-2], auch für andere Beispiele der H_2^+, H_3^+ usw Reaktionen.

Mit anderen Wörten: es existieren Ladungsübertragungsreaktionen, die die Voraussetzungen für Populationsinversionen erfüllen können. Eine spezielle Form der obingen Reaktionen ist ein multiplikativer Reaktionsprozess (d.h. die Reaktionen bewirken eine Multiplation der Elemente). Seispiel ist der Photomultiplikationsprozress, siehe Abb. 2.36, und die Beispiel in §2.5.2 (am Anfang).

Untern den Bauelementen für CCD/CTD ist die Photodiode (ein Halbleiterlaser mit Lawineneffekt - 'Avalanche Photodiodes') ein geeigneter Kandidat für die hier benötigte Kinetik; hierzu Sze [E-60]:

> 'If the electrons (or holes in a semiconductor are accelerated to a sufficiently high-energy level by an electric field, impact ionnizations will occur and electron-hole pairs will be created. This phenomenon, called avalanche breakdown, had been used as a pumping scheme by Weiser and Woods in a p- -p sandwitch structure shown in Fig. 28. ..... '

Die im obigen Zitat gemeinte Abbildung ist Abb. 2.80

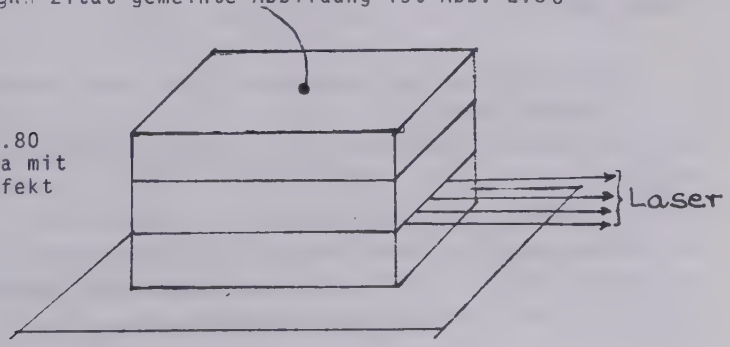


Abb. 2.80
Pumpschema mit
Lawineneffekt

(Das Buch von Sze [E-60] enthält eine detalierte Behandlung der verschiedenen Typen von MOS-Kondensatoren, p-n , n-p , p-n-p , n-p-n Brücken usw).
Für die drei Typen von laserfähigen Reaktionen, verweisen wir auf Abb. 2.56, siehe auch Kompa [E-35] .

Somit ist Transport und Extraktion von Ladungsmengen (als Spannung oder Lichtaustrahlung (Halbleiterlaser)) Informationsträger, siehe Dauel [E-16] für die Steuerung von Ladungsextraktion, und damit die Steuerung von Lichtausstrahlung. In diesem Sinne ist die Konditionierung eines Reaktions-Diffusions-Systems, zwecks gedächtnisgeprägter Informationsverarbeitung, die Steuerung von Reaktionen und Diffusionen von Elementen der Art, daß bestimmet Ladungsmenge als Informationsträger zu gewünschten Momenten stets verfügbar sind. sind. Bezüglich NEURONICS-I im Sinne des Seeligschen Reaktionsschemas werden folgende Zuordnungen gebraucht:

Reaktion ≙ Elementenmultiplikationen (die Reaktionen $MX + X \longrightarrow MX_2$ und $MX_2 \longrightarrow MX$ siehe der Reaktionsvorschlag (2.53)

Transport ≙ Diffusion von Elementen

Die hier angesprochene Elementen sind Elektronen-Löchern Paare.

Der Farbstofflaser bietet eine andere Alternative, da Gedächtniseffekte bei Verstärkung der Lumineszenz (durch elektrische Felder) erzielt werden kann, siehe Destriau [E-17] . Dies kann eingesetzt werden, zur Erzeugung bestimmter Lichttypen (z. B. fürs Pumpen durch Elektronenbündel - 'Electron Beam Pumping'). Aber die Anordnung, die auf der Grundlage von Abb. 2.67 und Abb. 2.69 benötigt werden, ist eine spezielle Aufgabe für sich, in die hier nicht eingegangen wird.

2.5.5 DAS SCHREIBEN UND LESEN EINES REAKTIONS-DIFFUSIONS-SYSTEMS IM NRZ - MODUS

Abb. 2.81 (Seite 141) ist eine bildliche Beschreibung von p-n-Brücken.
Durch eine Reihe von p-n-Brücken, die mit einander verbunden sind, ist es möglich, die Diffusion von Elektronen selektiv zu steuern.
Das Obertragungsprinzip ist in Abb. 2.82, siehe Collet et al [E-13]; (Abb. 2.82 ist auch auf Seite 141).

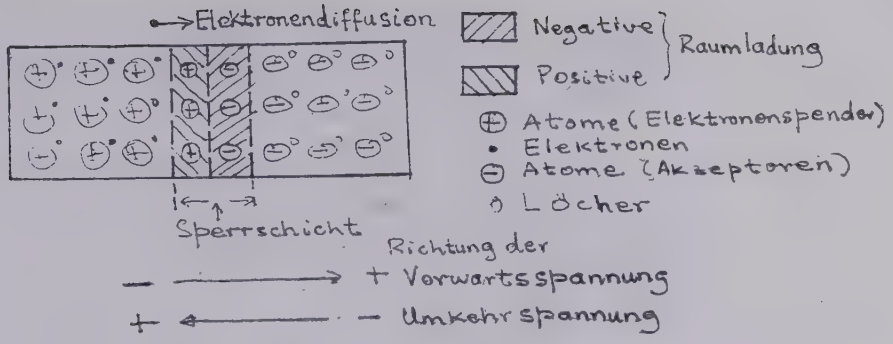


Abb. 2.81 Eine p-n Brücke mit Sperrschicht (Karaday [E-30])

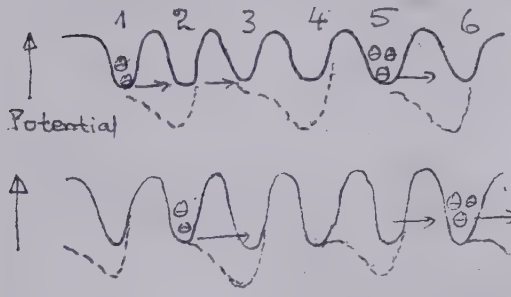


Abb. 2.82
Prinzip des Ladungstransports mit einer Reihe von Potentialtöpfen.
(Gestrichene Linie bedeuten Potentialänderung für Ladungstransport)

Für die Diffusionsgleichung dieser Operationen wird auf Collet et al [E-13] verwiesen; siehe auch Hesse [A-29] .
NEURONICS-I (mit p-n Brücken, die 'Avalanche Photodiodes' sind) als CTD hat daher folgende form: in Abb. 2.83 auf Seite 142 haben die Abkürzungen folgende Bedeutungen:

SQ - Steuerungsquelle zur Sicherung der in Abb. 2.69 gisicherten 1-dimensionalen Richtung

El - Elektronenmenge (unterschiedlich für R_2 , R_0 und R_{-2}

Für die Gebiete R_4 bis R_{-4} des NERUs führen wir die Zahlen (1) bis (9) ; mit diesen Zahlen ist Abb. 2.84 (Seite 142 die alternative Darstellung von Abb. 2.83.

NEURONICS-I ist daher ein spezielles Netz folgendes CCD/CTD, Abb. 2.85, auch auf Seite 142.

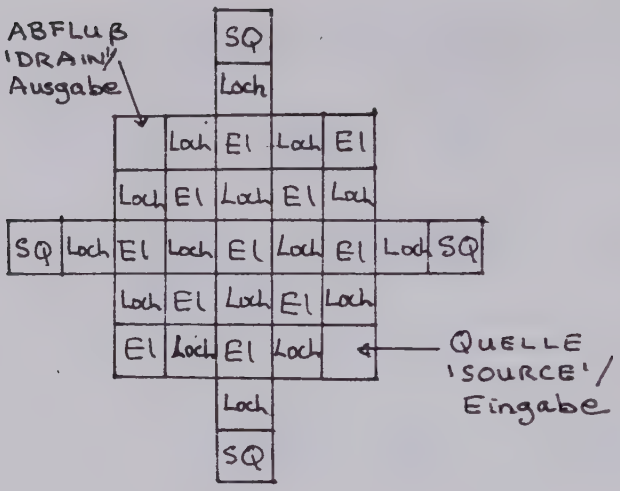


Abb. 2.83

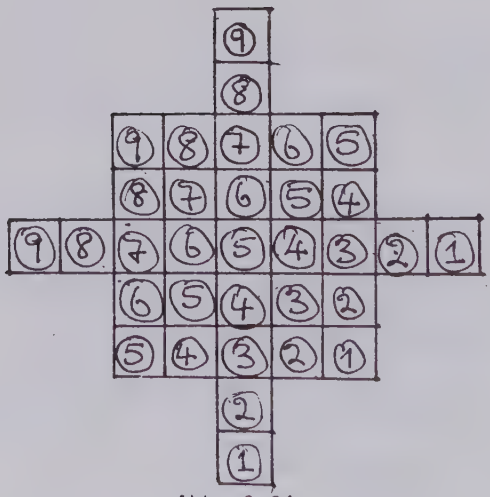
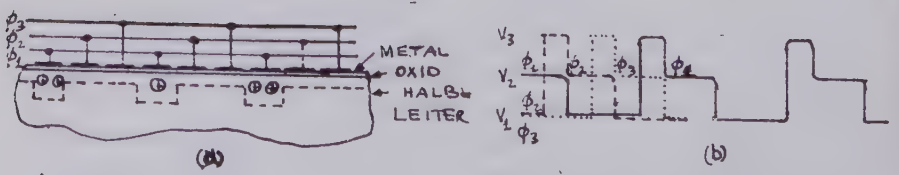


Abb. 2.84



lineare Kette von MOS-Kondesatoren.

Typische Wellenformen

Abb. 2.85

Für die Operationsweise dieser Anordnungen bezüglich des Transports von Elektronen und Löchern verweisen wir auf Barbe et al [E-5] und [E-6], Goetzberger et al [E-22], Kelley [E-32] Motsch [E-43], Sze [E-60], Unger et al [E-62] usw.

Folgende Zuordnungenmacht Neuronics-I zu einer integrierten Schaltung für Eingabe, STM und Ausgabe:

Eingabeblock	(1)	bis	(3)
STM-Block	(4)	bis	(6)
Ausgabe-Block	(7)	bis	(9)

Mit Hilfe von eindeutieg unterscheidbaren Wellengruppen lassen sich diese Blocke stets unterscheiden. Abb. 2.86 stellt eine solche Wellengruppenform da:

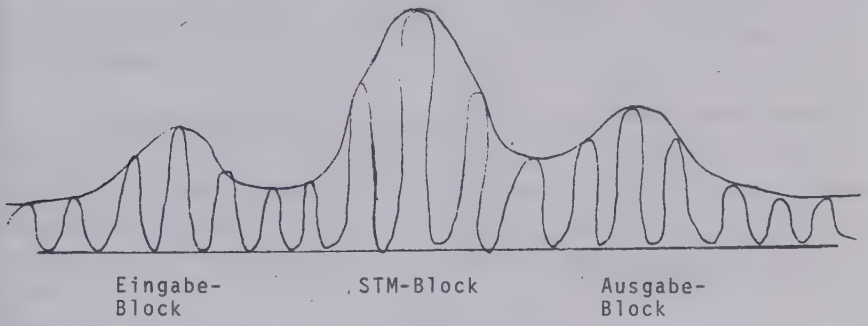


Abb. 2.86

Mit Ausgabe-Block als Eingabe ergibt such eine lineare Kette von NEURONICS-I!

ANMERKUNG 2.50: Es ist nicht notwendig mit 9 verschiedenen Spannungen, die Wellengruppen in Abb. 2.86 zu erzeugen. Dieselbe Spannung kann für (1), (4) und (7) engesetzt werden, allerdings mit variablen Kondensator-Widerstand-Schaltung zwischen (1) und (4), und zwischen (4) und (7). Dasgleiche gilt auch für die anderen Elemente.

Abb. 2.87 (Seite 144) ist eine Matrixdarstellung dieser Struktur. Diese Abbildung ist den Abb. 2.12, 2.13 und 2.14 verwandt. Die Steuerungen der Operationen besorgt die Zeit, die benötigt wird, um von R_4 bis R_{-4} zu gelingen, vgl für Nervenfaser Mbaeyi [A-41] und [A-42]. Wegen der unterschiedlichen Weglängen (wegen Diffusionsverzweigungen), die NEURONICS-I bietet, ergeben sich im Grunde zwei Zeitintervalle für die Übergänge Ein-

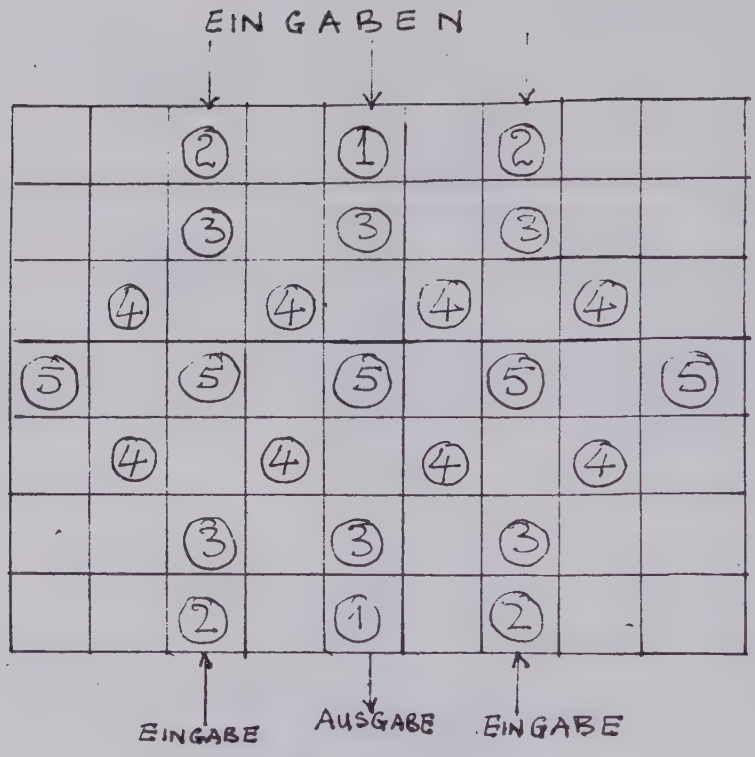


Abb. 2.87

gabe-Block ⟶ STM-Block, und STM-Block ⟶ Ausgabe-Block. Block. Unter Berücksichtigung der Verweilzeit in diesen Blocken, erhalten wir zwei Zeitintervalle, deren in Teilmenge die Eingabe-Ausgabesteuereungen ermöglichen. Dies ist ein Warteschlangeproblem, dessen Behandlung die Rahmen dieser Arbeit sprengt. Wichtig für diese Warteschlangeaufgabe ist die prinzipielle Sicherung der Existenz der Wellengruppenstruktur in Abb. 2.86; dieser Arbeot wird diese Frage gewidmet. Die Antwort wird in Kapitel 3 bis 5 hier gegeben.

KAPITEL 3

Wege zur Gedächtnisprägung durch Reaktions- Diffusions-Systeme

In diesem Kapitel werden die angekündigten Vorbereitungen (Kapitel 1) fortgesetzt, vor allem die Erörterungen über die bereits in Kapitel 2 teilweise behandelnten Randwertaufgaben. Das 1. Ziel ist die Begründung der periodischen Struturen, die zur Lösung der gestellten Aufgabe (Frage F2) beitragen. Im Falle des Leitbilds, Nervenfaser, ergeben sich diese periodischen Strukturen von selbst aus NEREMAX (als die periodische Wiederholung von NERU längst der Nervenfaser), und damit periodische Randwertprobleme. Dies wird hier weiter präzisiert. Anschließend wird die Differenzierung der SS (stationären Zustände), die durch die Definitionen 2.10 bis 2.13 eingeführt wurden, dafür angewandt, die Rahmen für Konditionierungsmodelle für Frage F2 zu entwerfen.

3.1 Gedächtnis durch periodischen Strukturen:

Da die Frage F2 im Zusammenhang mit Abb. 1.2 abgeleitet wurde, liegt der hiergestellten Aufgabe folgende Vermutung zugrunde: Eine Kette gleichartiger Einheiten garantiert die Ausbreitung einer Erscheinung ohne Formveränderungen. Eine solche Kette gleichartiger Einheiten ist eine periodische Struktur; in die Voraussetzungen dafür sollen hier weiter eingegangen werden.

3.1.1 RANDWERTPROBLEME VON EVOLUTIONSSYSTEMEN MIT SCHWELLEN-ZUSTANDSERSCHEINUNGEN

Randwerte sind wichtige Kommunikationsträger in Evolutionsvergängen; (sie geben an, wie viele Materie und/oder phänomenologische Effekte zwischen verschiedenen (Unter-)Teilen ausgetauscht werden). Die allgemeine Randwertaufgabe , bereits in §2.3.5 eingeführt, sollen hier näher betrachtet werden. Der Einfachheit halber beschränken wir uns gleich auf die Erfordernisse des Leitbildes, Nervenfaser, dieser Arbeit. Gesucht sind die Randwerte für die Fortpflanzung eines Nervenumpulses. Wir werden daher mit Randwertaufgaben für phänomenologische Effekte (elektrische Aktivität des gereizten Nervs) beginnen.

Es sei e^* die Energiedichte am stationären Zustand ('Conservation Threshold) eines Prozesses auf einem (chemischen) Medium, und $r(t)$ ein Reizimpuls. Dann ist folgende Bedigung erforderlich

für die Verwandlung des Mediums in einen Erregungsträger:

(3.1) $$|r(t)| \geq |e^*|$$

Es wird folgende Annahme gemacht:

ANNAHME 3.1: $r(t)$ *ist beschränkt für alle* $t \in \mathbb{R}_t$.

Von den Einwirkungs- und Reaktionsabläufen here gesehen, gehen Reizwellen von 0 über ein Maximum zurück zum Null. Als Funktion der Zeit hat $r(t)$ daher folgende graphische Darstellungen, Abb. 3.1

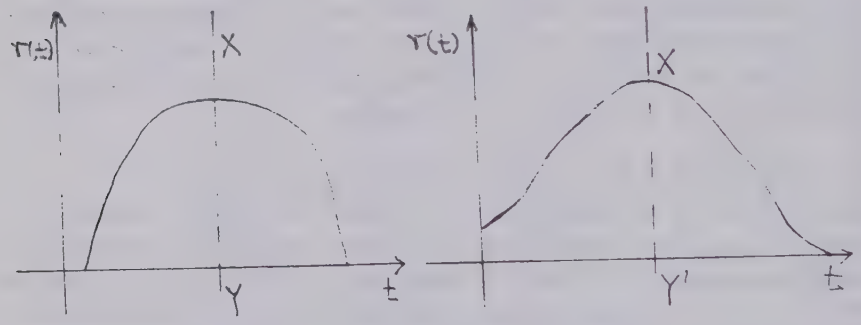


Abb. 3.1

Rechts und links von der Linie XY bzw X'Y' in Abb. 3.1 gelten:

(3.2) $$\frac{\partial r}{\partial t} < 0 \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial r}{\partial t} > 0$$

(vgl (2.106), (2.107)).

Für die spezifische Aufgabe dieser Arbeit ist ein $r(t)$ gesucht, dessen detailierte Beschaffenheit folgenden Tatsachen Rechnung trägt:

a) die drei Zustände, die für den NRZ-Modus notwendig sind, und
b) das 5-State-Automat-Prinzip der Evolution für die Schaltung zwischen SS gleichen Typus.

Dies kombiniert man mit einer Berücksichtigung der Bistabilität des Flip-Flops (der Eigenschaft, die für Abb. 1.2 gefordert ist). Infolgedessen hat $r(t)$ eine der in Abb. 3.2 abgebildeten Formen; das Pendeln der Reizwerte innerhalb des Intervals $[a, b]$ ist eine Voraussetzung für die Erhaltung des NRZ-Modus (der Gedächtnis-operationen).

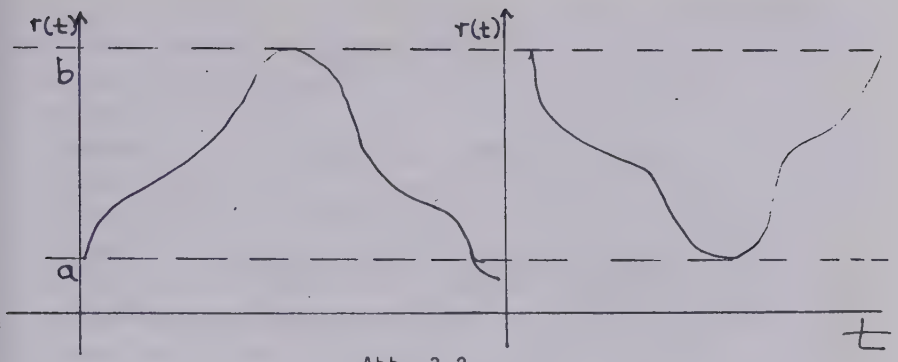


Abb. 3.2

Damit sich das Medium von Erregungsträger in anregbares Medium verwandelt, ist es offenbar notwendig, daß die weitere Randbedingungen im Modell des Prozesses, vorerst representativ als $b(t)$ bezeichnet, der Bedingung

(3.3) $$b(t) \simeq r(t)$$

genügt; somit ergibt sich

(3.4) $$|b(t)| \geq |e^*|$$

als die notwendige Bedingung für die weitere Ausbreitung. Daher sind die Randbedingungen, die zur Lösung von Frage F2 erforderlich sind, zyklischer Art.

ANMERKUNG 3.2: Für die Rückentwicklung von einem SS (mit einem höheren Wert) zu einem mit niedrigeren braucht das Ungleichheitszeichen "$\geq$" in (3.1) bzw. (3.4) nicht geändert zu sein. Für diesen Fall bekommen $b(t)$ und e^* negative Vorzeichen, die in dieselbe Ungleichung zurückführt.

Der Sachverhalt, der durch (3.1) bis (3.4) gekennzeichnet wird, z.B als Voraussetzung für die Entstehung des Aktionspotentials einer Nervenfaser, wird durch spezifische geordnete Struktur der Unterprozesse bzw. Mikroprozesse $\{(e_i, p_i)\}$ bzw $\{(e_{ij}, p_{ij})\}$ erzeugt und erhalten. Dies liefert eine kombinatorische Aufgabe, die mit Hilfe von Randwertproblemen untern präzisiert wird.

Für die erstrebte Konditionierung ist folgender Fall von beson-

derer Bedeutung: Ist

(3.5) $$|\hat{r}_{i'}(t)| < |e^*|$$

mit $$|\hat{r}_{i'}(t) - e^*| \leq |\bar{\varepsilon}|$$

(3.6) $$|\bar{\varepsilon}| \longrightarrow 0 \quad t \longrightarrow +\infty$$

dann erhebt sich folgende Frage: Für welche Folge

(3.7) $$r(t) = \sum_{i'=1}^{n'} \hat{r}_{i'}(t - \bar{\tau}_{i'}')$$

$0 < \tau_1' < \tau_2' < \cdots < \tau_{n'}' < +\infty$ mit

(3.8) $$\hat{r}_{i'}(t - \tau_{i'}') = \begin{cases} \hat{r}_{i'}(t) & t = \tau_{i'}' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

kann die Gleichung (3.7) derart werden, daß die Ungleichung (3.1) bzw. (3.4) erneut erzeugt werden ?
Es ist bekannt, daß beim Leitbild, Nervevfaser, mehrere hintereinander folgende Reizwellen, je nach Dichte, einen Aktionspotential auslösen konnten, obwohl die als einzelne der Ungleichung (3.5) genügen. Die Identität (3.7) beschreibt die Dichte der Reizwellen, siehe §A1 für Dichte von Reizwellen als wichtiger Faktor in der Definition von adaptiven Systemen.

Die Betrachtung der Folge von Dichten wie in (3.7) bergt in sich die Implikation, daß fortgesetzte Einwirkungen von Reizen in kurzen Abständen eine Häufung von Resteinflüssen vergangener Reize bewirkt, die zur Entstehung neuer SS führen konnten. Damit ist die Frage nach den Restzuständen eines Prozesses angesprochen, die schon in Zusammenhang mit Diffusionseigenschaften in §2.1.1 erörtert wurden.

3.1.2 ALLGEMEINE VERKETTUNGSPROBLEME BEI SALTATORISCHER DIFFUSION
Die knappe Ausführung hier ist als Einführung in die spezifischere Darstellung gedacht, die in §3.1.3 unten gegeben wird; sie soll die Komplexität der zu betrachtenden Problemkreise zu verdeutlichen helfen.

Es wird angenommen, daß ein Prozes aus $\tilde{m}$ Unterprozessen besteht, die durch ihre Interaktionen unter einander zur Enstehung neuer Muster oder zur Aufrechterhaltung spezifischer Verhalten führen. Da diese Interaktionen, laut der Besprechungen der Bedeutung der Randwerte in §2.3.3 durch Energie- und/oder Materieaustausche an gemeinsamen Grenzen (siehe die Zerlegungen in §2) bestimmt sind, definieren die Zahl der von Nullverschiedenen Randwerten die Anzahl der Verbindungselemente zwischen den Komponenten. Die kombinatorisch möglichen Netze, die durch diese Verbindungselemente geschaffen werden, entsprechen den zu erwartenden verschiedenen Mustern. Das heisst: Über die Zahl der auftretenden Randbedingunen lässt sich kombinatorisch Verbindungen ermitteln, die Muster definieren.

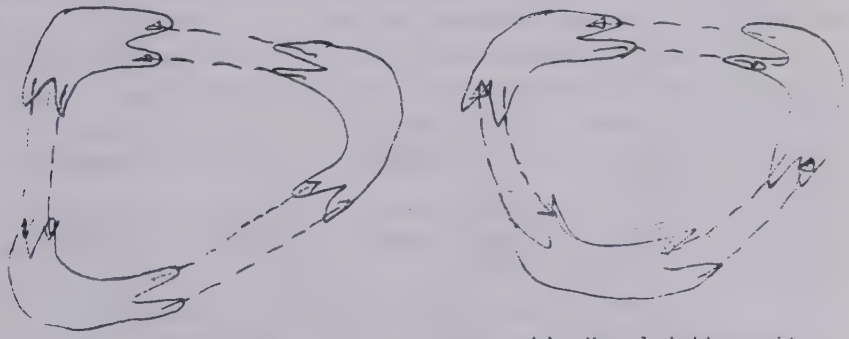
Es sei b_i^- die Anzahl der Randbedingungen, die vom i-ten Komponenten ausgehen, und b_i^+ die Anzahl der Randbedingungen, die an den i-ten Komponenten enden.

DEFINITION 3.3: *Die Interaktionen unter $\tilde{m}$ Unterprozessen (Komponenten) erzeugen stets abgeschlossene Strukturen, falls es für jeden Komponenten der Bedingung*

$$b_i^- + b_i^+ = 2(\tilde{m}-1) \tag{3.9}$$

genügt wird.

An Hand von n-Ecken auf der Ebene lässt sich die Bedeutung von Definition 3.3 nachprüfen. Für $\tilde{m} = 3$ und $b_i^- = b_i^+ = 2$ genügen folgende Figuren der Bedingung (3.9):



a) Vergleichbar mit einer Zirkulation

b) Vergleichbar mit gleichgewichtigenden lokalen Zirkulationen aus drei Quellen

Abb. 3.3

Strukturelle Veränderungen entstehen dann, wenn die Bedingung in (3.9) nicht mehr gelten; dafür gibt es dann

$$b_i^- + b_i^+ > 2(\tilde{m}-1)$$

(3.10) oder

$$b_i^- + b_i^+ < 2(\tilde{m}-1)$$

Je nach dem, ob $b_i^+ > 0$ oder $b_i^- > 0$ der Ungleichungen in (3.10) genügt, erhält man eine der folgende Alternative:

1) Ein Prozess gibt etwas ab, oder
2) ein Prozess empfängt etwas.

Komplexere Austausche beihalten beide Möglichkeiten gleichzeitig.

Die verbindenden Austausche zwischen zwei Komponenten können sich durch mehrere Randbedingungen vollziehen. Daher werden folgende Mengen

$$\tilde{S}_i = \bigcup_{\sigma_i=1}^{b_i^-} \tilde{S}_{i\sigma_i} \tag{3.11}$$

mit den Kardinalzahlen

$$|\tilde{S}_{i\sigma_i}| = \binom{b_i^-}{\sigma_i} = \frac{(b_i^-)!}{(\sigma_i)!\,(b_i^- - \sigma_i)!}$$

$$|\tilde{S}_i| = \sum \binom{b_i^-}{\sigma_i} = P_i \tag{3.12}$$

betrachtet; dies ist schlichthin die Potenzmenge der Randwerte und definieren Randbedingungen, die einzeln, in Paaren usw genommen werden. (Manche Teilmenge können auch die leeren Menge sein, zum Beispiel unter der Voraussetzung, daß die Wiederholung bestimmter Kombinationen ausgeschlossen sind).
Die Anzahl der möglichen Verbindungen, die vom i-ten Komponenten ausgehen, wird dann

$$b_i' = \sum_{\sigma_i'=1}^{\bar{\mu}_i} \tilde{S}_{i\sigma_i'} \qquad \bar{S}_{i\sigma_i'} \in \tilde{S}_{i\sigma_i'} \tag{3.13}$$

$$1 \leq \bar{\mu}_i \leq b_i^-$$

Die Gesamtheit aller möglichen Kombinationen für abgeschlossene Strukturen ist dann:

(3.14) $$\sum_{i=1}^{\tilde{m}} \sum_{\bar{\mu}_i=1}^{b_i^-} \binom{p_i}{\bar{\mu}_i} = \sum_{i=1}^{\tilde{m}} (b_i^+ + b_i^-) = 2\tilde{m}(\tilde{m}-1)$$

- neue Muster sind die Ergebnisse von Prozessen, die sich unter Gleichgewicht von Aufnahmen und Abgaben von Einflusselementen vollziehen.
Für die restlichen Fälle ergeben sich die Ungleichungen:

(3.15) $$\sum_{i=1}^{\tilde{m}} \sum_{\bar{\mu}_i=1}^{b_i^-} \binom{p_i}{\bar{\mu}_i} > 2\tilde{m}(\tilde{m}-1)$$

$$\sum_{i=1}^{\tilde{m}} \sum_{\bar{\mu}_i=1}^{b_i^-} \binom{p_i}{\bar{\mu}_i} < 2\tilde{m}(\tilde{m}-1)$$

- neue Muster sind die Ergebnisse von Prozessen, bei denen es ein Nettogewinn oder -Verlust an Aufnahme bzw Abgabe von Einflusselementen gibt.

Da jeder Evolutionsprozess durch die dualen Dichtefunktionen (e, ρ) und ihre Hierarchie charakterisiert ist (Kapitel 2), gibt es stets Paare von den Bedingungen (3.14) und (3.15). Es wird angenommen, daß (3.14) und (3.15) sich auf die Materiedichte beziehen; bezeichne durch (3.14)´ und (3.15)´ ähnlich definierte Bedingungen für die Energiedichte
Dann gibt es vier Klassen von Bedingungen für Muster:

	e	ρ
Klasse 1	(3.14)´	(3.14)
Klasse 2	(3.14)´	(3.15)
Klasse 3	(3.15)´	(3.14)
Klasse 4	(3.15)´	(3.15)

Von Interesse sind Klasse 2 und 3; (Klasse 4 lässt sich durch sequenzielle Kombinationen von den Klassen 2 und 3 erstzen, siehe '5-State-Automat'-Prinzip). Wegen der spezifischen Merkmale der zwei wichtigsten Nervenpotentiale (Ruhe- und Aktionspotential) - 'Neural Specifity' genannt - gehört der Nervenfaser der Klasse 2 an, reagiert allerdings auf äussere Reize mittels Zwischenstadien, die der Klasse 3 zugeordnet wird. Das heisst: Die Nerven-

faser reagiert auf äussere Einflusselemente mittels interner (Selbst-)Reorganization, mit anschliessender Rückkehr zum Ausgangszustand. Somit sind Bedingungen von Typ (3.14) wichtig für interne (Selbst-)Reorganization von Prozessen; (für ausführliche Erörterung dieser Frage bezüglich Aggregationsprobleme wird auf Mbaeyi [C-19] verwiesen).

Die obigen Betrachtungen zeigen die Komplexität der möglichen Verbindungen, die betrachtet werden konnten. Für die hier gestellte Aufgabe muss daher weiter Einschränkungen gemacht werden; Basis dafür hier ist die erset Vereinfachung, die längst durch die Annahme von saltatorischer Diffusion geschehen ist. Weitere Vereinfachungen und deren Konsequenzen erfolgen unten.

3.1.3 SPEZIELLE VERKETTUNGSFÄLLE - PERIODISCHE STRUKTUREN AM BEISPIEL DER NERVENFASER

Für die Aufgabe dieser Arbeit lässt sich das allgemeine Verkettungsproblem folgendermassen vereinfachen:

a) Eine Nervenfaser wird einer 1-dimensionalen Kette von Unterprozessen äquivalent gesetzt, siehe Kapitel 1 und 2 für entsprechende Erörterungen.

b) Saltatorische Diffusion für eine 1-dimensionale Kette von Unterprozessen hat die unmittelbare Folge: ES GIBT NUR INTERAKTION VON UNMITTELBAR BENACHBARTEN GLIEDERN DER KETTE.
Somit ist $\mathfrak{m} = 2$ in §3.1.2

c) Verzweigungen der einzelnen Randbedingungen zwischen benachbarten Gliedern der Kette ist ausgeschlossen.

Für das weitere benötigen wir

ANNAHME 3.4: *In einem Netz Seeligscher Oszillatoren wie in Abb. 1.2, wird vorausgesetzt, daß hochstens drei Randbedingungen, als Verbindungselemente zwischen den Komponenten, den Ausschlag geben.*

Da jeder Kompartment desSeeligschen Modells ingesamt 4 Konzentrationen (als Unterprozessen aufgefasst, siehe §2.1) enschliessen, ergeben sich folgende Alternativen:

a) Kompartment zu Kompartment Verbindung durch einzelne Randwerte:

Die hier auftrentende kombinatorische Möglichkeit ist insgesamt:

$$\binom{4}{1} = 4 = \frac{4!}{1!\,3!}$$

Werden die Elemente rein representativ mit A(1), A(2), A(3) und A(4) bezeichnet, so ist Abb. 3.4 eine Representation dieser Permutationen:

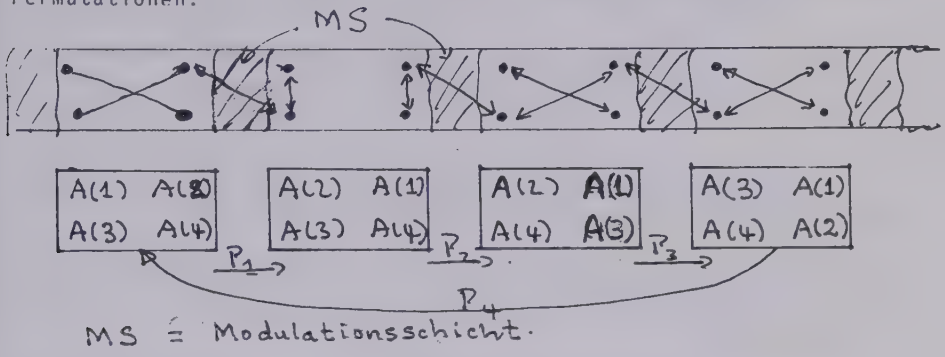


Abb. 3.4

b) Verbindung der Kompartmente durch zwei Randwerte: Die kombinatorische Anzahl ist dann

$$\binom{4}{2} = 6 = \frac{4!}{2!\,2!}$$

Abb. 3.5 ist eine Veranschaulichung dieser Permutationen:

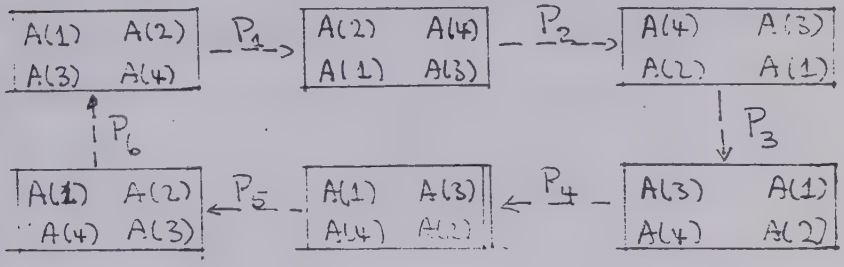


Abb. 3.5

c) Verbindung der Kompartmente durch drei Randwerte: Die kombinatorische Anzahl ist:

$$\binom{4}{3} = 4 = \frac{4!}{3!\cdot 1!}$$

Die Permutationen veranschaulicht durch A(1) bis A(4) ergibt:

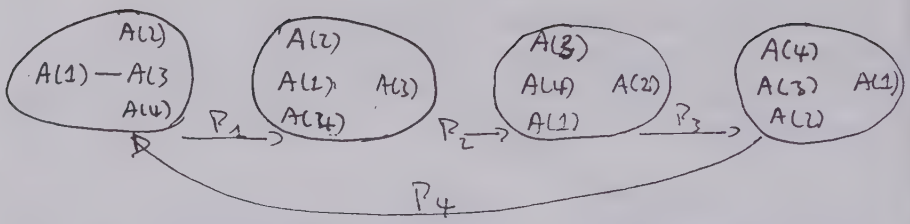


Abb. 3.6

d) Verbindung durch vier Randwerte: Dies ergibt nur eine Möglichkeit, and daher auch keine Variation des Verhaltens.

Die Figuren, die diese Möglichkeiten kennzeichnen, sind durch Abb. 3.7 a) bis d) dargestellt; (a) bis d) entsprechend der obigen Ausführungen):

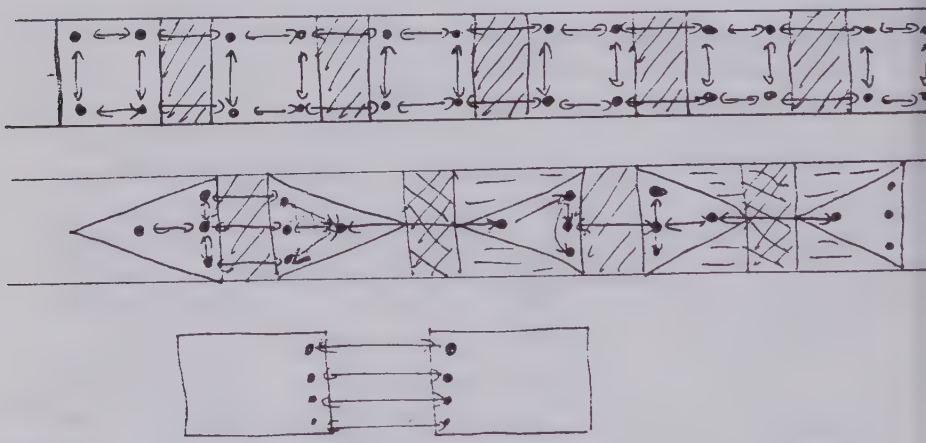


Abb. 3.7

Es ist aus Abb. 3.7 d) leicht zu sehen, daß die 4. Alternative - Verbindungen durch 4 Randwerte praktisch uninteressant ist. Ferner ist ersichtlich, daß Verbindungen mittels zwei Randwerte die großtmögliche Variationen bieten. Vor allem soll bezüglich der Nervenfaser und der damit assozierten NERU - der Matirx der Nervenpotentialfortpflanzung - folgendes bemerkt werden: Die Übergänge von R_4 bis R_0 und R_0 bis R_{-4} entsprechen jeweils 6 internen Permutationen; ausserdem sind haupsächlich zwei Elemente (Na^+ und K^+) die zwei Einflusselemente, deren Randbedingungen, die mikros-

kopischen Struktur für den Nervenaktionspotential.

ERZEUGTE PERIODISCHE STRUKTUREN: Es ist offenbar klar aus Abb. 3.7 a) bis c), daß die Ausgangszusammensatzung der Randwerte nach $\binom{4}{b}$ Permutationen wieder erhalten wird, wobei b die Anzahl der verbindenden Randwerte ist.
Bezeichnet man die Ausgangslage eines Kompartments durch die Menge $\mathcal{G}$, dann bedeutet die obige Feststellung folgendes:
Es gibt eine Transformation

(3.16) $$\mathcal{T} : \mathcal{G} \longrightarrow \mathcal{G}$$

der Menge $\mathcal{G}$ in sich selbst, wobei

(3.17) $$\mathcal{T} \triangleq P_L \circ P_{L-1} \circ \cdots \circ P_1$$

und $L = \binom{4}{b}$, $P_{j'}$, $j' = 1, \ldots, L$ sind die oben erwähnten Permutationen.

Ist eine 1-dimensionales Netz Seeligscher Oszillatoren wie in Abb. 1.2 die Menge $\mathcal{G}'$, dann ist $\mathcal{G}'$ eine zyklische Gruppe mit $\mathcal{T}(\mathcal{G})$ als erzeugendes Element, wobei

(3.18) $$\mathcal{G} \equiv \bigcup_{r=1}^{S} \mathcal{G}_r \quad |\mathcal{G}_r| = |\mathcal{G}|, \; S \geq L$$

Folgendes Bild veranschaulicht diese Feststellung:

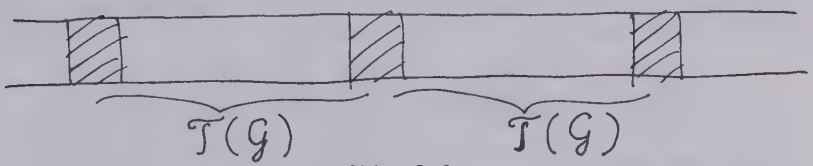


Abb. 3.8

Dies führt dann zu periodischen bzw. zyklischen Randwertproblemen. Diese Feststellung heisst auch: Die Entwicklung von Erregungsträger ins anregbare Medium gleicht der sequentiellen Erzeugung einer periodische Struktur; (die Matrix NERU für die Fortpflanzung des Nervenpotentials verdeutlicht dies sehr).

3.2 Spezielle Lösungen für Evolutionssysteme: 'Solitary Waves'

Die stationären Zustände, die als 'Conservation Thresholds' definiert sind (siehe Definition 2.11) bedingt spezieller Lösungsformen, nämlich solche, die ihre Formen konservieren - als Ausdruck der Erhaltung der stationären Zustände. Die Wellenformen, die dieser Bedingung genügen, sind 'Solitary Waves'. (Eine andere gleichbedeutende Bezeichnung für 'Solitary Waves' ist 'Constant Profile Waves' siehe Karfunkel [A-33] ; in dieser Arbeit wird die mehr standardizierte Bezeichnung 'Solitary Waves' den Vorzug gegeben). Eine weitere interessante Wellenform (eine spezielle Form von 'Solitary Waves') sind 'Solitons': Es sind Wellen, die nicht nur ihre Profile konservieren, sondern auch Wellen, die bei Welleninterferenzen nicht deformiert werden, d.h. Wellen, die ihre Formen auch bei Interferenzen mit anderen Wellen erhalten, siehe Scott [A-55] . Chemsiche Systeme besitzen keine Interferenzerscheinungen.

Daher werden nur 'Solitary Waves' in dieser Arbeit betrachtet. ' 'Solitary Waves' sind Wellen, die durch ihren konstante Profilformen ausgezeichnet sind. Für die Nervenfaser, das Leitbild dieser Arbeit, erfüllt der Nervenimpuls diese Voraussetzung stets.
Eine Welle (auf einem anregbaren Medium) ist ein 'Solitary Wave', wenn sie an jedem (räumlichen) Ort des anregbaren Mediums und zu jeder Zeit nur durch eine und dieselbe Amplitude und Wellenlänge charakterisiert ist. Das heisst: Wellen, deren Formcharakterisierungen von örtlichen und zeitlichen Variablen unabhängig sind. Ist die Welle eine sich ausbreitende Welle, so ist ihre Geschwindigkeit auch von örtlichen und zeitlichen Variablen unabhägig.
An Hand der Substitution (2.34) bedeutet dies:

$$\frac{d\psi}{dt} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \sum_{r=1}^{d} \frac{\partial \psi}{\partial x_r} \frac{dx_r}{dt} \tag{3.19}$$

dies ergibt die Bedingung:

$$\frac{d\psi}{d\xi} \left(\sum_{r=1}^{d} \omega_r \frac{dx_r}{dt} - v \right) = 0 \tag{3.20}$$

Die Veränderlichkeit des Raumes, die durch die Ausdrücke (dx_r/dt) in (3.20) gegeben wird, bezieht sich im chemische System auf die örtlichen Strukturveränderungen durch entsprechende chemische Kinetik, die die Existenz der Wellen ermöglichen; (für rein physi-

kalische Systeme wird anderswo gezeigt, daß sich die (dx_r/dt) $r=1,\dots,d$ auf dielektrische, diamagnetische Eigenschaften beziehen lassen). Auf eine Behandlung dieser Frage wird hier verzichtet, da dies weit über den Rahmen dieser Arbeit führen wird.
Für die hier gestellte Aufgabe, genügt es zu beachten, daß

$$\sum_{r=1}^{d} \omega_r \frac{dx_r}{dt} - v = \frac{d\xi}{dt} = 0 \qquad (3.21)$$

die unmittelbare Folgerung

$$\xi = \text{const.} \qquad (3.22)$$

nach sich zieht; dies ist die Bedingung, die hier gebraucht wird, siehe Kapitel 2 , 4 und 5.

'Solitary Waves' können daher sowohl laufende als auch stehende Wellen sein - TW- bzw. SW-Wellen. Gewöhnlich (für rein physikalische Systeme) werden stehende Wellen über die Oberlagerung von Wellen (Wellenintereferenzen) definiert; aber chemische Systeme, als anregbare Medien, haben, wegen Refraktier- bzw. Relaxationserscheiningungen, keine Intereferenzerscheinungen. Allerdings kann ein optisches Bild von stehenden Wellen auf einem (chemischen) anregbaren Medium dadurch erzeugt werden, daß das Medium unter Einflüsse von Reizwellen gesetzt wird, deren Zeittaktfolge derart gewählt ist, daß die Zeit für den Abstand zwischen zwei laufenden Wellen genau der Refraktier- bzw. Relaxationszeit entspricht.
Auf einer Nervenfaser (Leitbild der Arbeit) sieht dies so aus:

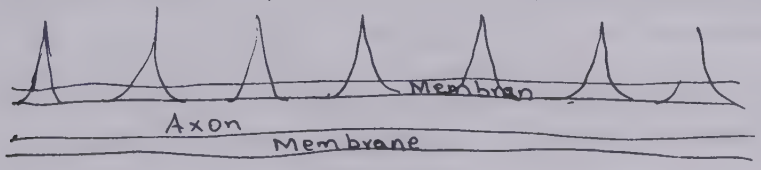


Abb. 3.9

Der Nervenimpuls genügt aller Eigenschaften eines 'Solitary Waves'; die Abstände zwischen den einzelnen gleichgearteten Wellen wirken dann wie knotenpunkten.
Auf die hier vorgeschlagene integrierte Schaltung - NEURONICS I - übertragen, bekommen wir dann eine der folgenden Alternativen, Abb. 3.10, a) und b).

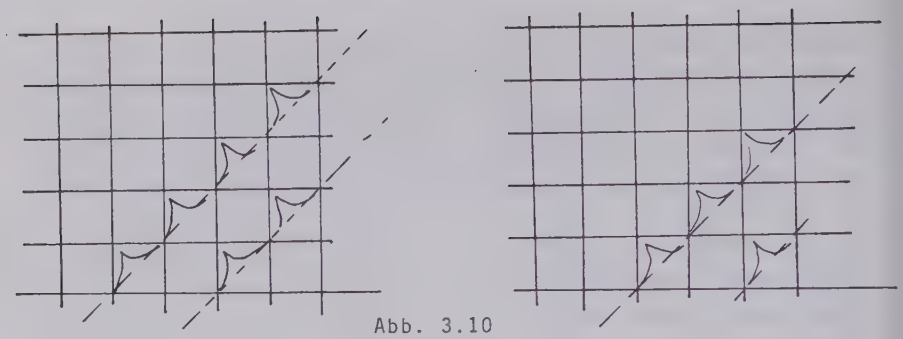


Abb. 3.10

Als 3. Alternative gilt die Erzeugung der Wellen auf allen Felder. (Die speziell gewählte Lage auf den Diagonal, die den Vergleich mit Abb. 3.9 verdeutlicht, deuten auf die nächsten Problemen (räumliche Orientierung von Wellen) hin, die mit der Realisierung von NEURONICS I, und anderen ähnlichen bzw. verwandten Konstruktionen, eng verbunden sind; auf diese Fragen, die zusätzlichen mathematischen Aufgaben ergeben, wird hier nicht eingegangen).

Zum Abschluß dieses Abschnitts, soll eine Verbindung zu der Eingenschaft hergestellt werden, die als Ausgangspunkt für die hier gestellte Aufgabe dient.
Ein Flip-Flop System, wie der Seelischer Universaloszillator, hat drei Extrema, die dann erkennbar sind, falls sie durch drei eindeutige representative Wellenformen unterscheidbar sind. Dies ist der Fall, wenn drei Solitary Waves vorausgesetzt werden, die sich durch ihre Amplituden, Wellenlänge und Geschwindigkeiten unterscheiden lassen (vgl mit der Operationsweise für CCD und dem Vorschlag für NEURONICS-I).
Mit anderen Wörten: Die hier gestellte Aufgabe ist dann gelöst, wenn ein System erzeugt werden kann, das durch drei charakteristischen 'Solitary Waves' gekennzeichnet wird. Wie dies zu erreichen sei, folgt unmittelbar im nächsten Abschnitt dieses Kapitels.

3.3 Wege zur Konditioniering eines adaptiven Systems: Entwicklungsfähige Systeme

Es wird angenommen, daß die Konditionierung eines Systems das Ziel hat, es so zu beschaffen, daß es bestimmte Verhaltensweisen aufweist; (dies soll als das allgemeine Schreiben eines Systems verstanden werden). Hierzu ist folgende Eigenschaft erforderlich:

LEMMA 3.5: *Ein System ist konditionierbar, dann und nur dann wenn es ein Entwicklungssystem ist bzw. wird.*

(Siehe §A1 im Anhang für entsprechende Definitionen).

Nach Definition von Entwicklungssystemen (§A1) bedeutet Konsitionierbarkeit die Schaffung von spezifischen Reaktionen (als meßbare Ausgabefunktionen) zu spezifischen Eingabenfunktionen (als äussere Reize verstanden); das heisst: Spezifische Zuordnungen zuschen Eingabe- und Ausgabenfunktionen sollen geschafenn werden. Auf die hier gestellte Aufgabe konkret angewandt heisst dies: Der durch Definition 2.31 beschriebene Tatbestand soll geschaffen werden. Dieses Problem kann direkt dadurch angegangen werden, daß stochastische dynamische Systeme sofort herangezogen werden, mit anschliessender Suche nach deterministischen Äquivalenten. Allerdings wird dieser Weg wegen der in §1.4 erläuterten Gründe nicht beschritten.

Der hier beschrittene Weg ist: Durch einfache Modelle deterministischer Übergänge soll der Weg (für stoschastische Modelle, §1.4) vorbereitet werden. Wir wenden uns daher eher der Frage zu, wie deterministische Übergänge zwischen drei eindeutig verschiedenen 'Solitary Waves' geschehen. Hierzu errinern wir an die Tabelle 1 (Seite 53 dieser Arbeit). Ein Ausschnitt davon, als $(e-\rho)$-Graph dargestellt, ergibt folgendes Bild:

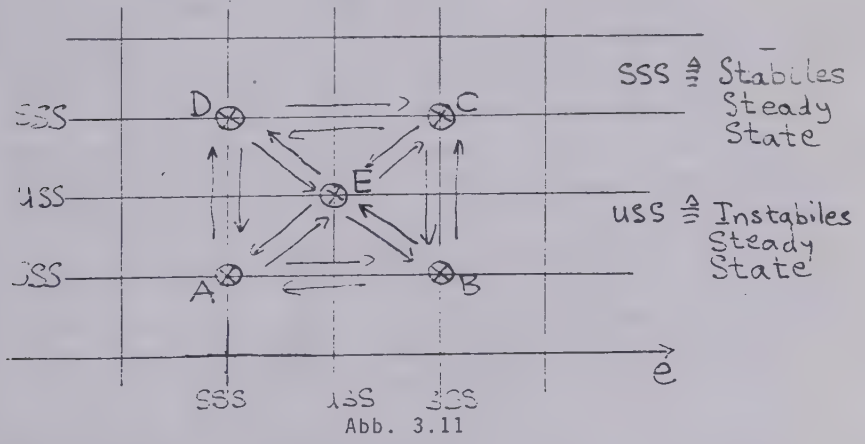


Abb. 3.11

Nach dem '5-State-Automat'-Prinzip sind A, B, C, D Ausgang- und Zielpunkte, die der Voraussetzungen für 'Conservation Thresholds' (Definition 2.11) genügen. Die möglichen Übergänge samt ihrer

charakterisierenden Bedingungen sind:

a) A $\rightleftharpoons$ B

(3.23)

a) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \simeq 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} > 0$

b) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \simeq 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} < 0$

b) A $\rightleftharpoons$ D

(3.24)

a) $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \simeq 0$

b) $\frac{\partial \rho}{\partial t} < 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \simeq 0$

c) D $\rightleftharpoons$ C

(3.25)

a) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \simeq 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} > 0$

b) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \simeq 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} < 0$

d) B $\rightleftharpoons$ C

(3.26)

a) $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \simeq 0$

b) $\frac{\partial \rho}{\partial t} < 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \simeq 0$

e) A $\rightleftharpoons$ C (über E)

(3.27)

a) $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} > 0$

b) $\frac{\partial \rho}{\partial t} < 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} < 0$

f) D $\rightleftharpoons$ B (über E)

(3.28) a) $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} < 0$

b) $\frac{\partial \rho}{\partial t} < 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} > 0$

Durch Kombination von diesen Ungleichungen, ist es möglich einheitliche Beschreibungen für diese Obergänge zu definieren; es entstehen folgende Systeme von Ungleichungen:

(3.29) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \leq 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \geqslant 0$

(3.30) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \geqslant 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \geqslant 0$

(3.31) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \geqslant 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \leq 0$

(3.32) $\frac{\partial \rho}{\partial t} \leq 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} \leq 0$

Die Ungleichungen beziehen sich jeweils auf die Punkte A, B, C und bzw. D; sie geben einheitliche Bedingungen für das Hinsteueren zu diesen Punkten. Für das Wegsteuern kehrt man die Ungleichszeichnen um.
Die Systeme, die in Kapitel 2 betrachtet wurden, sind Gleichungen. Um die obigen Ungleichungen zu Gleichungen zu machen benötigen wir folgende Funktionenen:

$$U_{k'l'} : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^{\hat{k}} \longrightarrow \mathbb{R}$$

(3.33) $U_{k'l'} \triangleq U_{k'l'}(e,\rho,\mu') \;,\; (e,\rho) \in \mathbb{R}^2,\; \mu' \in \mathbb{R}^{\hat{k}}$

$k', l' = 1, 2$; $\mathbb{R}^{\hat{k}}$ – $\hat{k}$-dim. Parameterraum.

mit den Eigenschaften:

(3.34) $U_{k'l'} \geqslant 0 \quad$ oder $\quad U_{k'l'} \leq 0.$

Mit Hilfe dieser Funktionen können die Ungleichungen (3.29) bis (3.32) in Gleichungen überführt werden, wie folgt:

$$\text{(3.35)} \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_{22} = 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} + u_{12} = 0$$

$$\text{(3.36)} \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_{21} = 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} + u_{12} = 0$$

$$\text{(3.37)} \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_{21} = 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} + u_{11} = 0$$

$$\text{(3.38)} \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + u_{22} = 0 \quad \& \quad \frac{\partial e}{\partial t} + u_{11} = 0$$

Die Funktionen $u_{\kappa'\iota'}$ definieren Steuerungsmittel, mit deren Hilfe die Übergänge, d.h. die Konditionierung gezielt steuert werden können; eine Präsizierung der zu betrachtenden Steuerungsfunktionen im nächsten Abschnitt beschliesst diese Betractungen der Übergänge.

3.4 Definitionen zulässiger Steuerungsfunktionen für chemische Evolutionsprozesse

Die Funktionen $u_{\kappa'\iota'}$, $\kappa', \iota' = 1, 2$ besagen: Die Übergänge zwischen den stationären Zuständen geschehen als Folge von Zu- oder Abfuhr von Energie und/oder Materie.
Allerdings geschieht dies durch sequenzielle Heranziehung energetischer und materiellen Veränderungen (siehe §2.2). Infolgedessen sind auch die Funktionen

$$\text{(3.39)} \qquad \begin{aligned} \tilde{u}_{1\iota'} &: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{\hat{\kappa}} \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad \tilde{u}_{1\iota'} \triangleq \tilde{u}(e, \mu') \\ \tilde{u}_{2\iota'} &: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{\hat{\kappa}} \longrightarrow \mathbb{R}\,, \quad \tilde{u}_{2\iota'} \triangleq \tilde{u}_{2\iota'}(\rho, \mu') \end{aligned}$$

zulässig.
Da die Punkte A, B, C, und D als stbil gelten, gibt es

(3.40) $|u_{k'l'}| < \epsilon$ bzw. $|\tilde{u}_{k'l'}| < \tilde{\epsilon}$, $\tilde{\epsilon} \rightarrow 0$

für die die Gleichungen (3.35) bis (3.39) und die Ungleichungen (3.29) bis (3.32) gleichermassen befriedigt werden.

DEFINITION 3.6: *Die Funktionen* $u_{k'l'}$ *bzw.* $\tilde{u}_{k'l'}$ *für die Bedingungen (3.40) zutreffen, werden als zulässige Störungen von Evolutionssystemen bezeichnet.*

Für alle anderen Fälle differenzieren wir folgende Arte von zulässigen Steuerungsfunktionen:

DEFINITION 3.7: *Die Funktionen* $u_{k'l'}$ *bzw* $\tilde{u}_{k'l'}$ *für die die Ungleichungen*

(3.41) $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0$ &/oder $\frac{\partial e}{\partial t} > 0$

gelten werden als Aktivierungsfunktionen verstanden.

DEFINITION 3.8: *Die Funktionen* $u_{k'l'}$ *bzw.* $\tilde{u}_{k'l'}$ *für die die Ungleichungen*

(3.42) $\frac{\partial \rho}{\partial t} < 0$ &/oder $\frac{\partial e}{\partial t} < 0$

zutreffen, werden als Inhibitionsfunktionen bezeichnet.

DEFINITION 3.9: *Die Funktionen* $u_{k'l'}$ *bzw* $\tilde{u}_{k'l'}$ *heissen schlicht stabilisierend, falls sie ein Evolutionssystem aus dem Gültigskeitsbereich von Definition 3.7 oder Definition 3.8 in den Gültigkeitsbereich von Definition 3.6 überführen.*

ANMERKUNG 3.10: Definition 3.9 impliziert auch Definition 3.6, aber das Umgekehrte gilt nicht. Mit anderen Wörten: Die Klasse der zulässigen Störungsfunktionen ist eine echte Unterklasse der Menge der stabilisierenden Funktionen.

Somit zerfällt die Menge, $\mathcal{U}$, der gesamten zulässigen Steuerungsfunktionen in drei echte Untermengen (U_1, U_2, U_3), gemäß Definition 7 bis 9.

Infolgedessen bestehen die (deterministischen) Konditionierungswege aus folgenden Schritten:

Alternative A:

1. Schritt: Beeinflüssung mittels Reize aus der Menge zulässiger Störungsfunktionen.
2. Schritt: Im gestörten Zustand werden Reize aus der Menge der Aktivierungsfunktionen eingesetzt.
3. Schritt: Aktivierungsfunktionen werden durch passende Inhibitionsfunktionen abgelöst.
4. Schritt: Stabilisierungsfunktionen lösen die Inhibitionsfunktionen ab.

Alternative B:

Dies ist der Alternative A ähnlich, nur daß die 2. und 3. Schritte mit einander vertauscht werden, und im 4. Schritt lösen die Stabilisierungsfunktionen die Aktivierungs- anstatt Inhibitionsfunktionen ab.

Im Kapitel 5 werden weitere Klasse von Steuerungsfunktionen eingeführt, nämlich in der Form von Mengen von Anfangswerten; vor allem allem wird dort die Transformation von Randwertaufgaben in Anfangswertaufgaben behandelt.

II. TEIL

MATHEMATISCHE ANALYSE

VON

ENTWICKLUNGSSYSTEMEN

ZASSEMFASSUNG VON TEIL II

DIESER TEIL DER ARBEIT IST DEN MATHEMATISCHEN PROBLEMEN GEWIDMET, DIE SICH AUS DEN MODELLKONSTRUKTIONEN IN TEIL I ERGEBEN; FOLGENDE ERGEBNISSE WERDEN ERZIELT:

1. MITTELS DES BIHARISCHEN SATZES FÜR DIFFERENTIALUNGLEICHUNGEN (SIEHE BIHARI [F-2] , DEMIDOVICH [F-6]) WIRD GEZEIGT, DASS DIE EXISTENZ VON EINDEUTIG VERSCHEIDENEN STEADY STATES DIE VORAUSSETZUNG FÜR KONDITIONIERBARKEIT BILDET.

2. FÜR KONDITIONIERBARE SYSTEM, DIE ZUGLEICH DURCH TURING-VERHALTEN UND EBENE-WELLEN CHARAKTERISIERT WERDEN, WIRD DURCH KONSTRUKTION ENTSPRECHENDER EIGENWERTE GEZEIGT, DASS SICH DIE RESULTIERENDE MATHEMATISCHE AUFGABE ALS EINE ZUSAMMENFASSUNG VON ZWEI KLASSISCHEN AUFGABEN (DER HOPFSCHEN AUFGABE, SIEHE MARDEN UND MCCRACKEN [F-19] UND DER MALKINSCHEN AUFGABE, SIEHE MALKIN [F-16]) ERGIBT; DIESE WIRD DIE HOPF-MALKINSCHE AUFGABE GENANNT.

3. KONDITIONIERBARKEIT (ALS STRUKTURIERTER ÜBERGANG ZWISCHEN GEWISSEN STEADY STATES) WIRD DANN AUF FOLGENDE AUFGABE REDUZIERT: ITERATION MIT EINEM STABILEN ANFANGSWERT FÜHRT MITTELS VERÄNDERLICHEN OPERATOREN (SIEHE KURPEL [F-13]) IN EINEN ANDEREN STABILEN WERT. DAFÜR SIND ZWEI GEKOPPELTEN ITERATIONEN ERFORDERLICH, DEREN ALLGEMEINE STRUKTUREN UND KONVERGENZ SKIZZENHAFT AUFGEZEICHNET SIND.

4. FÜR DIE EXISTENZ VON EBENE-WELLEN SIND PERIODISCHEN LÖSUNGEN BEZÜGLICH $\xi = \omega \cdot x - \nu t$ DER ABGELEITETEN DGELEN ERFORDERLICH; DAFÜR ERGEBEN SICH BEDINGUNGEN, DIE DEN URABSCHEN (SIEHE URABE [G-25] BIS [G-27]) ÄHNLICH SIND. ZUSAÄTZLICH DAZU WERDEN DIE STRUKTUREN DER PERIODEN DURCH SKIZZIERUNG DER BEZIEHUNG ZU ELLIPTISCHEN FUNKTIONEN PRÄZISIERT. DURCH RÜCKFÜHRUNG DER ABGELEITETEN DGLEN AUF DIE STURM-LIOUVILLESCHE AUFGABE WERDEN EINSCHRÄNKENDE BEDINGUNGEN FÜR DIE PARAMETER GEWONNEN, SO DASS ETWAIGE NUMERISCHE BETRACHTUNGEN ERLEICHTERT WERDEN. WEITERE EINSCHRÄNKUNGEN FÜR DIE PARAMETER WERDEN

DURCH VARIATIONSRECHNUNG BZW. AUFSTELLUNG DER EULER-LAGRANGESCHEN GLEICHUNGEN (SIEHE GELFAND UND FORMIN [N-31]) GEWONNEN.

5. DIE ERSTEN NUMERISCHEN BETRACHTUNGEN BESCHRÄNKEN SICH DARAUF, DIE VORZÜGE DER TSCHEBYSCHEFFSCHEN APPROXIMATION ZU ZEIGEN; HIERZU, BEDINGUNG (5.36), DIE DER ANZAHL DER PERIODISCHEN LÖSUNGEN EINE OBERE SCHRÄNKE ZUWEIST.

6. DIE ZWEITE NUMERISCHE BETRACHTUNG BEHANDELT DIE TRANSFORMATION DER ABGELEITETEN DGLEN IN IGLEN (SIEHE INCE [F-10] UND CHAMBERS [G-4]). DURCH AUSNUTZUNG DER FORTSETZBARKEITSBEDINGUNGEN FÜR DIE LÖSUNG VON IGLEN (SIEHE KANTOROVICH [G-15]) WERDEN DIE SCHRITTE FÜR ITERATIONEN MIT VERÄNDERLICHEN OPERATOREN GEZEIGT, UND SOMIT DIE KONDITIONIERUNGSWEGE.

7. DIE DRITTE NUMERISCHE BETRACHTUNG BEFASST SICH MIT DER KONSTRUKTION VON FUNKTIONEN, DIE DIE IM MODELL ANZUTREFFENDEN KOEFFIZIENTEN (DIFFUSSIONS- RELAXATIONSKOEFFIZIENTEN USW) ERSETZEN. DANN, AUSGEHEND VON SEELIGSCHEN ORIGINALWERTEN, ERLEICHTERN SIE DIE GEZIELTE ERZEUGUNG VON ZUFALLSDATEN MITTELS MONTE CARLO FÜR ENTSPRECHENDE NUMERISCHE SIMULIERUNGSVERSUCHE (FÜR DIE EIN GROBER FLUSSDIAGRAM MIT DEN HAUPTBETRACHTUNGEN SKIZZIERT WIRD).

KAPITEL 4

Qualitative Verhalten von Entwicklungssystemen

4.1: Existenz und Stabilität von Modellgleichungen:

Im jetztigen Abschnitt dieses Kapitels werden folgende Fragen behandelt: Existenz, Stabilität und Bifurkation von Lösungen der Modellgleichungen, die in dieser Arbeit eingeführt sind (siehe Kapitel 2 und 5). Aber zuerst wird gezeigt, daß die Punkte A, B, C, und D (Abb. 3.11) eindeutig verschieden sind; dies ist eine notwendige und hinreichende Bedingung für mehrfache stationäre Zustände als wesentliche Voraussetzung für die Obergänge, die der Konditionierung characteristisch sind.

Im Kapitel 3 wurden, unter Berücksichtigung der möglichen Konditionierungswege, die Ungleichungen (3.29) bis (3.32) als die Beschreibung der Punkte A, B, C, und D (Abb. 3.11) abgeleitet. Die Darstellung als die Identitäten (3.35) bis (3.38) mittels der Konstruktionen (3.33) und (3.34) ermöglicht den Vergleich mit den Modellgleichungen in Kapitel 2 (§2.3.3), die auch als Identitäten gewonnen wurden. Durch diesen Vergleich ist es leicht nachprüfbar, daß die Ungleichungen (3.29) bis (3.32) die Ungleichungen

$$-\tau(e)\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} + \sigma(e)\nabla^2 e + \frac{\partial \sigma}{\partial e}(\nabla e)^2 + \varphi + \tilde{\tilde{f}}(e,\mu) \geq 0$$

$$-\eta(\rho)\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + D(\rho)\nabla^2 \rho + \frac{\partial D}{\partial \rho}(\nabla \rho)^2 + \phi + \bar{\bar{f}}(\rho,\mu) \leq 0 \qquad (4.1)$$

$$-\tau(e)\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} + \sigma(e)\nabla^2 e + \frac{\partial \sigma}{\partial e}(\nabla e)^2 + \varphi + \tilde{\tilde{f}}(e,\mu) \geq 0$$

$$-\eta(\rho)\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + D(\rho)\nabla^2 \rho + \frac{\partial D}{\partial \rho}(\nabla \rho)^2 + \phi + \bar{\bar{f}}(\rho,\mu) \geq 0 \qquad (4.2)$$

$$-\tau(e)\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} + \sigma(e)\nabla^2 e + \frac{\partial \sigma}{\partial e}(\nabla e)^2 + \varphi + \tilde{\tilde{f}}(e,\mu) \leq 0$$

$$-\eta(\rho)\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + D(\rho)\nabla^2 \rho + \frac{\partial D}{\partial \rho}(\nabla \rho)^2 + \phi + \bar{\bar{f}}(\rho,\mu) \geq 0 \qquad (4.3)$$

$$-\tau(e)\frac{\partial^2 e}{\partial t^2} + \sigma(e)\nabla^2 e + \frac{\partial \sigma}{\partial e}(\nabla e)^2 + \varphi + \tilde{\tilde{f}}(e,\mu) \leq 0$$

$$-\eta(\rho)\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + D(\rho)\nabla^2 \rho + \frac{\partial D}{\partial \rho}(\nabla \rho)^2 + \phi + \bar{\bar{f}}(\rho,\mu) \leq 0 \qquad (4.4)$$

erzeugen; dabei ersetzt ρ in den Ungleichungen (3.29) bis (3.32) die ρ' (oberste Ebene der hierarchischen Gliederung, Kapitel 2) in der Gleichung (2.96) auf Seite 103. Die ähnliche Strukturierung der Ungleichungen für e ergibt sich aus diesbezüglichen Feststellungen in §2.2. Für die unteren Ebenen ergeben sich aus den Gleichungen (2.97) bis (2.99) ähnliche strukturierte Ungleichungen wie die in (4.1) bis (4.4); sie werden daher nicht gesondert ausgeführt.

Für das weitere gilt folgendes: Ohne Beschränkung der Allgemeinheit gestattet der parallel-verarbeitende Algorithm, Abb. 2.11, stets, daß nur eine passende Hierarchie aus drei Ebenen betrachtet werden darf.

Mit Hilfe der Substitution

$$\begin{aligned} \tilde{\xi} &= \tilde{\psi}(\omega\cdot x - vt) = \tilde{\psi}_1(\xi) \\ \tilde{\rho} &= \tilde{\psi}_2(\omega\cdot x - vt) = \tilde{\psi}_2(\xi) \end{aligned} \qquad \psi_1, \psi_2 \in \mathbb{R}^{N_1} \qquad (4.5)$$

$N_1 = 1 + m + \sum_{i=1}^{m} n_i$ (siehe die Bezeichungen und Symbole, die der Arbeit vorangestellt sind), ergeben sich aus (4.1) bis (4.4), und dengleichen für die unteren Ebenen e_i, ρ_i u.s.ω folgende Typen von gewöhnlichen Differentialungleichungen (in vektoriellen Zusammenfassungen in $\mathbb{R}^{N_1}$):

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\psi}}_1 &\geq \tilde{\tilde{F}}_1(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \tau(\tilde{\psi}_1), \sigma(\tilde{\psi}_1), \mu) \\ \dot{\tilde{\psi}}_2 &\leq \tilde{\tilde{F}}_2(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \eta(\tilde{\psi}_2), D(\tilde{\psi}_2), \mu) \end{aligned} \qquad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\psi}}_1 &\geqslant \tilde{\tilde{F}}_1(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \tau(\tilde{\psi}_1), \sigma(\tilde{\psi}_1), \mu) \\ \dot{\tilde{\psi}}_2 &\geqslant \tilde{\tilde{F}}_3(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \eta(\tilde{\psi}_2), D(\tilde{\psi}_2), \mu) \end{aligned} \qquad (4.2)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \leq \tilde{F}_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau(\tilde{\Psi}_1), \sigma(\tilde{\Psi}_1), \mu)$$

(4.8)

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \geq \tilde{F}_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta(\tilde{\Psi}_2), D(\tilde{\Psi}_2), \mu)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \leq \tilde{F}_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau(\tilde{\Psi}_1), \sigma(\tilde{\Psi}_1), \mu)$$

(4.9)

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \leq \tilde{F}_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta(\tilde{\Psi}_2), D(\tilde{\Psi}_2), \mu)$$

Die Funktionen $\tilde{F}_{i'}$ $i' = 1, 2, 3, 4$ ergeben sich, nach dem Einsetzen von (4.5) in (4.1) usw, durch die vektoriellen Zusammenfassungen als Differentialungleichungen 1. Ordnung, vgl (2.36), (2.49).

ANMERKUNG 4.1: In diesen Differentialungleichungen ist

(4.10) $$\xi = \omega \cdot x - \nu t$$

(vgl. (2.34)) die Variable. Die Identität (4.10) ist, aufgrund der hierarchischen Gliederungen in Kapitel 2, nur gültig in verschiedenen Teilbereichen von $x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, siehe Kapitel 2. Für die gleichzeitige numerische Integration der Ungleichungen ist folgende Ähnlichkeitstransformation erforderlich:

(4.11) $$\xi = \bar{\varkappa} \xi' - \eta \qquad \xi' = \omega \cdot x - \nu t$$

$\xi \in [0, 1]$, $0 < \bar{\varkappa} \leq 1$ und $\eta \geq 0$, siehe §5.1.5 unten, und auch Mbaeyi [B-20]

LEMMA 4.2: *Die Differentialungleichungen (4.6) bis (4.9) sind invariant unter der Ähnlichkeitstransformation (4.11).*

Beweis: Siehe Bluman und Cole [F-3].

Durch diese Ähnlichkeitstransformation gehen die Ungleichungen (4.6) bis (4.9) in die Ungleichungen

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \geq \bar{\varkappa}^{-1} \tilde{F}_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau(\tilde{\Psi}_1), \sigma(\tilde{\Psi}_1), \mu)$$

(4.12)

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \leq \bar{\varkappa}^{-1} \tilde{F}_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta(\tilde{\Psi}_2), D(\tilde{\Psi}_2), \mu)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \geq \varkappa^{-1}\tilde{F}_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau(\tilde{\Psi}_1), \sigma(\tilde{\Psi}_1), \mu)$$

(4.13)

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \geq \varkappa^{-1}\tilde{F}_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta(\tilde{\Psi}_2), D(\tilde{\Psi}_2), \mu)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \leq \varkappa^{-1}\tilde{F}_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau(\tilde{\Psi}_1), \sigma(\tilde{\Psi}_1), \mu)$$

(4.14)

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \geq \varkappa^{-1}\tilde{F}_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta(\tilde{\Psi}_2), D(\tilde{\Psi}_2), \mu)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \leq \varkappa^{-1}\tilde{F}_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau(\tilde{\Psi}_1), \sigma(\tilde{\Psi}_1), \mu)$$

(4.15)

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \leq \varkappa^{-1}\tilde{F}_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta(\tilde{\Psi}_2), D(\tilde{\Psi}_2), \mu)$$

über.

ANNAHME 4.3: *Die Funktionen* $\tilde{F}_{\iota'}$ $\iota' = 1,2,3,4$ *sind in allen Variablen* $\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu$ *stetig.*

Dann liefert die direkte Integration der Ungleichungen die Integralungleichungen, siehe Lakshmikantham et al [F-14]:

$$\tilde{\Psi}_1 \geq \tilde{c}_1 + \varkappa^{-1}\int_0^1 \tilde{F}_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \mu)\, d\xi''$$

(4.16)

$$\tilde{\Psi}_2 \leq \tilde{c}_2 + \varkappa^{-1}\int_0^1 \tilde{F}_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta, D, \mu)\, d\xi''$$

$$\tilde{\Psi}_1 \geq \tilde{c}_1 + \varkappa^{-1}\int_0^1 \tilde{F}_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \mu)\, d\xi''$$

(4.17)

$$\tilde{\Psi}_2 \geq \tilde{c}_3 + \varkappa^{-1}\int_0^1 \tilde{F}_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta, D, \mu)\, d\xi''$$

$$\tilde{\Psi}_1 \leq \tilde{c}_4 + \varkappa^{-1}\int_0^1 \tilde{F}_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \mu)\, d\xi''$$

(4.18)

$$
\begin{aligned}
\tilde{\Psi}_2 &\geq \tilde{c}_3 + \varkappa^{-1} \int_0^1 \tilde{F}_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta, D, \mu)\, d\xi'' \\
\tilde{\Psi}_1 &\leq \tilde{c}_4 + \varkappa^{-1} \int_0^1 \tilde{F}_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \mu)\, d\xi'' \\
\tilde{\Psi}_2 &\leq \tilde{c}_2 + \varkappa^{-1} \int_0^1 \tilde{F}_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \eta, D, \mu)\, d\xi''
\end{aligned}
\tag{4.19}
$$

Die Existenz der Lösungen dieser Integralungleichungen wird mit Hilfe eines Biharischen Satzes indirekt geführt; der Biharische Satz lautet:

SATZ 4.4: *Es seien* $\bar{u}(t) \geq 0$, $f^*(t) \geq 0$, $\bar{\bar{u}}(t)$, $f^*(t) \in G[t, +\infty)$ *und die Integralgleichung*

$$
\bar{\bar{u}}(t) \leq \tilde{K} + \int_{t_0}^{t} f^*(\tau'')\, \Phi(\bar{\bar{u}}(\tau''))\, d\tau'' \tag{4.20}
$$

vorgegeben, $\tilde{K}$ *= Konstante,* Φ *eine in* $\bar{\bar{u}}(t) \in (0, \tilde{u}')$ *stetige, positive, nicht abnehmende Funktion. Ferner sei*

$$
\bar{\bar{\chi}}(\bar{\bar{u}}) = \int_{\tilde{K}}^{\tilde{u}'} \frac{d\bar{\bar{u}}}{\Phi(\bar{\bar{u}})}, \quad 0 < \bar{\bar{u}} < \tilde{u}' \tag{4.21}
$$

Dann gilt

$$
\bar{\bar{u}}(t) \leq \bar{\bar{\chi}}^{-1}(\bar{\bar{u}}) \left[\int_{t_0}^{t} f^*(t'')\, dt'' \right] \tag{4.22}
$$

falls

$$
\int_{t_0}^{t} f^*(t'')\, dt'' < \bar{\bar{\chi}}(\tilde{u}' - 0) \quad t_0 \leq t < +\infty \tag{4.23}
$$

wobei $\bar{\bar{\chi}}^{-1}(\bar{\bar{u}})$ *die Inverse von* $\bar{\bar{\chi}}(\bar{\bar{u}})$ *bedeutet.*

Beweis: Siehe Bihari [F-2] und Demidovich [F-6].

KOROLLAR 4.5: *Jede der Integralungleichungen (4.16) bis (4.19) besitzt für jedes* $\mu \in \mathbb{R}^{\kappa}$ *eine eindeutige Lösung falls* $\bar{\bar{\chi}}_{\mu}(\psi)$ *und* $[\bar{\bar{\chi}}_{\mu}(\psi)]^{-1}$ *existieren.*

Beweis: Eine direkt Folgerung aus Satz 4.4

ANMERKUNG 4.6: Der Binarische Satz 4.4 ist eine Verallgemeinerung des Gromwall-Bellmanschen Satzes für Systeme von Differentialungleichungen, siehe Demodovich F-6 , Lakshmikantham F-14

Im Bezug auf die Integralungleichungen (4.16) bis (4.19) gelten in Satz 4.4 folgende Äquivalenzen:

$$\xi = t \; ; \quad \bar{\bar{u}}(t) = \tilde{\varphi}_1(\xi) \text{ oder } \tilde{\varphi}_2(\xi)$$

$$f^*(t) = 1 \; ; \quad \tilde{K} = \tilde{C}_{\iota'} \quad \iota' = 1, 2, 3, 4$$

(4.24)
$$\Phi(\bar{\bar{u}}(t)) = \tilde{F}_{\iota'}(\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)$$

$$\bar{\bar{\chi}}_{\iota'}(\bar{\bar{u}}(t)) = \int_{\tilde{C}_{\iota'}}^{\Psi} \left[\tilde{F}_{\iota'}(\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)\right]^{-1} d\psi$$

Die Forderung $\bar{\bar{u}}(t) \geq 0$ im Satz 4.4 enstpricht $\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2 \geq 0$

$\psi \triangleq (\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2)^T \geq 0$, da $\tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2$ die Substitutionen für die Dichtefunktionen e, ρ usw sind. Nach Definition sind Dichtefunktionen stets großer oder gleich Null.

Aus Satz 4.4 und (4.24) ergeben sich folgende Abschätzungen:

(4.25)
$$\tilde{\varphi}_1 \geq \left[\bar{\bar{\chi}}_1(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right], \quad \bar{\bar{\chi}}_1(\psi) = \int_{\tilde{C}_1}^{\Psi} \tilde{F}_1^{-1} d\psi$$

$$\tilde{\varphi}_2 \leq \left[\bar{\bar{\chi}}_2(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right], \quad \bar{\bar{\chi}}_2(\psi) = \int_{\tilde{C}_2}^{\Psi} \tilde{F}_2^{-1} d\psi$$

(4.26)
$$\tilde{\varphi}_1 \geq \left[\bar{\bar{\chi}}_1(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right]$$

$$\tilde{\varphi}_2 \geq \left[\bar{\bar{\chi}}_3(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right], \quad \bar{\bar{\chi}}_3(\psi) = \int_{\tilde{C}_3}^{\Psi} \tilde{F}_3^{-1} d\psi$$

(4.27)
$$\tilde{\varphi}_1 \leq \left[\bar{\bar{\chi}}_4(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right], \quad \bar{\bar{\chi}}_4(\psi) = \int_{\tilde{C}_4}^{\Psi} \tilde{F}_4^{-1} d\psi$$

$$\tilde{\varphi}_2 \geq \left[\bar{\bar{\chi}}_3(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right]$$

(4.28)
$$\tilde{\varphi}_1 \leq \left[\bar{\bar{\chi}}_4(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right]$$

$$\tilde{\varphi}_2 \leq \left[\bar{\bar{\chi}}_2(\psi)\right]^{-1}\left[\int_{\xi_0}^{\xi} d\xi''\right]$$

Aus der Stetigkeit von $\tilde{F}_{\iota'}$ und $\bar{\bar{\chi}}_{\iota'}$ bezüglich der Variable $\mu \in \mathbb{R}^K$ (Annahme 4.3) ergbit sich die Folgerung:

SATZ 4.7: Die Lösungen der Ungleichungen (4.6) bis (4.9) sind alle in $\mu \in \mathbb{R}^K$ stetig.

Beweis: Siehe Coddington und Levinson [F-4] oder Mitropolski [F-21].

Für die Abschätzungen (4.25) bis (4.28) ergibt sich

SATZ 4.8: Die Abschätzungen (4.25) bis (4.28) sind eindeutig verschieden, dann und nur dann, wenn

$$
\begin{aligned}
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) &\neq (\tilde{c}_1, \tilde{c}_3)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) &\neq (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) &\neq (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_3) &\neq (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_3) &\neq (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2)\\
(\tilde{c}_4, \tilde{c}_2) &\neq (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3)
\end{aligned}
\qquad (4.29)
$$

Für weitere qualitative Aussage wird folgendes benötigt:

ANNAHME 4.9: Die Funktionen $\tilde{F}_{\iota'}$ und $\bar{\bar{\chi}}_{\iota'}$ sind Lipschitz stetig in $\tilde{\varphi}_1$ und $\tilde{\varphi}_2$; das heisst: Es gelten

$$\|\tilde{F}_{\iota'}\|, \|\bar{\bar{\chi}}_{\iota'}\| < +\infty \quad \forall \tilde{\varphi}_1, \tilde{\varphi}_2 \text{ und } \forall \mu. \qquad (4.30)$$

in Sinne der Euklidische Norm von $\mathbb{R}^{N_1}$

SATZ 4.10: Die Lösungen der Ungleichungen (4.6) bis (4.9) bzw. (4.16) bis (4.19) sind alle stabil.

(Stabilität hier wird als die Beschränkheit aller Lösungen verstanden).

ANMERKUNG 4.11: Satz 4.10 enthält keine Aussage über asymptotische Stabilitätsverhalten.

Satz 4.8 hat eine Reihe von Konsequenzen; unmittelbar gilt:

SATZ 4.12: Die durch die Ungleichungen (4.6) bis (4.9) definierte Zustände eines Evolutionsprozesses sind eindeutig von einander verschieden, dann und nur dann, wenn die paarweise durch (4.29) definierten Ungleichneiten der Integrationskonstante $\tilde{c}_1, \tilde{c}_2, \tilde{c}_3, \tilde{c}_4$ stets gelten.

Als Voraussetzung für Satz 4.12 gilt:

BEHAUPTUNG 4.13: Die im Satz 3.12 notwendige Verschiedenheit der Zustände wird nur durch verschiedene Parameter $\mu \in \mathbb{R}^K$ gewährleistet.

Da $\mu \in \mathbb{R}^K$ sich auf die inneren Parameter eines chemischen Reaktions-Diffusions-Systems beziehen, ist Behauptung 4.13 die analytische Reduktion der hier gestellten Aufgabe auf die Bifurkationsprobleme, die durch die innere Veränderbarkeit des Systems hervorgerufen werden. Dies wird unten konstruktiv belegt (für die hier gestellte Aufgabe); vorerst, aber, wird ihre Richtigkeit vorausgeschickt.
Weitere Konsequenzen aus Satz 4.8 und Behauptung 4.13 sind:

KOROLLAR 4.14: Falls für alle

(4.31)
$$\begin{aligned}
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) &= (\tilde{c}_1, \tilde{c}_3)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_3) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3)\\
(\tilde{c}_1, \tilde{c}_3) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2)\\
(\tilde{c}_4, \tilde{c}_3) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2)
\end{aligned}$$

dann besitzt ein zur Betrachtung stehender chemischer Prozess nur einen einzigen stationären Zustand.

Aus Korollar 4.14 folgt dann

(4.32) $$(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2) = (\tilde{c}_1, \tilde{c}_3) = (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3) = (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2)$$

Bezogen auf Abb. 3.11 heisst dies konkret: Die Punkte A, B, C, und D fallen zusammen zu einem einzigen Punkt.

KOROLLAR 4.15: Es wird angenommen, daß die Ungleichungen (4.29) gelten, so daß die Punkte A, B, C, D, in Abb. 3.11 eindeutig verschieden sind (Satz 4.12). Falls der zu betrachtendem Prozess zwischen A und B, B und C, A und D, D und C, A und C oder D und B oszilliert, dann existiern $\mu^* \in I \subset \mathbb{R}^K$ derart, daß

(4.33)
$$\begin{aligned}
(\tilde{c}_1^*, \tilde{c}_2^*) &= (\tilde{c}_1, \tilde{c}_3) \quad \text{bzw} \quad (\tilde{c}_1^*, \tilde{c}_3^*) = (\tilde{c}_1, \tilde{c}_2)\\
(\tilde{c}_4^*, \tilde{c}_1^*) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3) \quad \text{bzw} \quad (\tilde{c}_4^*, \tilde{c}_3^*) = (\tilde{c}_1, \tilde{c}_2)\\
&\vdots\\
(\tilde{c}_4^*, \tilde{c}_3^*) &= (\tilde{c}_4, \tilde{c}_2) \quad \text{bzw} \quad (\tilde{c}_4^*, \tilde{c}_1^*) = (\tilde{c}_4, \tilde{c}_3)
\end{aligned}$$

Die Menge $I(\mu)$ hat die Mächtigkeit $|I(\mu)| \geq 3$

Mit anderen Wörten: Es existieren Parameter derart, daß die Punkte A, B, C, und D (Abb. 3.11) in einander überführbar sind. Dies ist die analytische Definition bzw. Voraussetzung für Konditionierbarkeit. Dabei sind $(\tilde{C}_1^*, \tilde{C}_2^*)$ usw die Ergebnisse der Iterationen (mit Hilfe veränderlichen Operatoren, §4.3 unten), wodurch die Übergänge $A \rightleftharpoons B$, $B \rightleftharpoons C$, $A \rightleftharpoons D$, $D \rightleftharpoons C$, $A \rightleftharpoons C$ und $D \rightleftharpoons B$ ermöglicht werden.

In diesem Abschnitt wurden die allgemeinen Bedingungen für die Verschiedenheit von Zuständen abgeleitet; diese werden in nachfolgenden durch spezifischere Bedingungen ergänzt und erweitert werden.

4.2 Das Hopf-Malkinsche Problem für Entwicklungssysteme

In diesem Abschnitt werden die Probleme, die mit den Obergängen zwischen den Punkten A, B, C, D (Abb. 3.11) zusammenhängen, weiter präzisiert und näher betrachtet. Zusammengefasst führen sie in eine Problemklasse hinein, die als das Hopf-Malkinsche Problem bezeichnet wird, da wir auf das gemeinsame Auftreten der klassischen Hopfschen und Malkinschen Aufgabe stossen. Zu diesem Zweck sollen die Ungleichungen (4.6) bis (4.9) erneut betrachtet werden, allerdings in anderen Formen, nämlich als

(4.34)
$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \geq A_1(\tau, \sigma, \mu)\tilde{\Psi}_1 + g_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$
$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \leq A_2(\eta, D, \mu)\tilde{\Psi}_2 + g_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$

(4.35)
$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \geq A_2(\tau, \sigma, \mu)\tilde{\Psi}_1 + g_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$
$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \geq A_3(\eta, D, \mu)\tilde{\Psi}_2 + g_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$

(4.36)
$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \leq A_4(\tau, \sigma, \mu)\tilde{\Psi}_1 + g_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$
$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \geq A_3(\eta, D, \mu)\tilde{\Psi}_2 + g_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$

(4.37)
$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 \leq A_4(\tau, \sigma, \mu)\tilde{\Psi}_1 + g_4(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$
$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 \leq A_2(\eta, D, \mu)\tilde{\Psi}_1 + g_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu)$$

Dabei sind $A_{\iota'}$ $\iota' = 1, 2, 3, 4$ usw veränderliche Operatoren

(veränderliche Matrizen), aber mit linearen Gliedern in $\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2$ Diese Formen der Ungleichungen brauchen nicht unbedingt die Ergebnisse eines Linearizierungsprozesses (unter üblichen Voraussetzungen, siehe z. B. Coddington + Levinson [F-4] oder Lakshmikantham et al [F-14]) zu sein. In chemischen Evolutionsprozessen sind lineare Glieder häufig durch die unterstützende chemische Kinetik gegeben, so daß sie (die lineare Glieder) von Anfang an Teile der Modellgleichungen sind, vgl. z. B. die Seeligschen Gleichungen (1.7). Dies wird hier voraussgesetzt.

Die notwendige Annahme über die nichtlineare Glieder $g_{\iota'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)$, $\iota' = 1, 2, 3, 4$ in (4.34) bis (4.37) lautet:

$$\|g_{\iota'}\| \leq \sum_{\kappa'=1}^{2} \gamma_{\iota'\kappa'} \tilde{\Psi}_{\kappa'}^2 , \quad |\gamma_{\iota'\kappa'}| < +\infty \qquad \iota' = 1, 2, 3, 4 \tag{4.38}$$

ANMERKUNG 4.16: Für die Anwendung von Satz 4.4 ist folgendes zu beachten: Mit

$$\Psi_{\kappa'}(\xi)\, e^{-A_{\iota'}\xi} \leq \Psi_{\kappa'}(\xi) \quad , \kappa' = 1, 2, \quad \iota' = 1, 2, 3, 4 \tag{4.39}$$

führt die Integration von (4.34) bis (4.37) zu IGLen, die jeweils auf die Form (4.20) zurückgeführt werden können.
Es ist leicht nachprüfbar, daß die Ungleichung (4.39) der Bedingung des Satzes 4.4 erfüllt.

Da die Punkte A, B, C, D, (Abb. 3.11) stationäre Zustände repräsentieren, gelten an diesen Stellen die Eigenschaften APTC-2 und APTC-3 (§2.2.2) für Diffusions- und Relaxationskoeffizienten. Daher bekommen wir für die Matrizen $A_{\iota'}$ $\iota' = 1, 2, 3, 4$ in (4.34) bis (4.37) an diesen Stellen die Matrizen $A^*_{\iota'}$ mit (fast) konstanten Elementen:

$$A_{\iota'} \longrightarrow \begin{cases} A^*_{\iota'}(\tau^*, \sigma^*, \mu) & \text{oder} \\ A^*_{\iota'}(\eta^*, d^*, \mu) \end{cases} \tag{4.40}$$

wobei σ^* d^* und τ^*, η^* die entsprechenden konstanten Diffusions- und Relaxationskoeffizienten in Umgebungen dieser Stellen sind.

4.2.1: EINGENWERTPROBLEME DER GEWÜNSCHTEN ZUSTÄNDE:
Ein Flip-Flop System, siehe Kap. 2, ob in RZ- oder NRZ-Modus betrieben, hat drei eindeutig verschiedene stationäre Zustände

- zwei stabile Zustände und einen instabilen. Die notwendige Voraussetzung dafür, daß die Punkte A, B, C, und D (Abb. 3.11) paarweise betrachtet die zwei stabilen Zustände darstellen, ist

$$\text{Re}\,\lambda_{\iota' m'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) < 0 \qquad \iota' = 1, 2, 3, 4 \tag{4.41}$$

und für den instabilen Zustand

$$\text{Re}\,\lambda_{\iota' m'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) > 0 \tag{4.42}$$

(ein instabiler Zustand liegt stets zwischen den Punkten A, B, C und D, Abb. 3.11). Dabei bedeutet

$$\lambda_{\iota' m'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) \qquad m' = 1, \ldots, N_1 \tag{4.43}$$

die Eigenwerte der Matrizen $A_{\iota'}$, $\iota' = 1, 2, 3, 4$

ANMERKUNG 4.17: Sind die Matrizen $A_{\iota'}$, $\iota' = 1, 2, 3, 4$ singulär, so setztman eine Störungsrchnung ein; dadurch werden die Matrizen $A_{\iota'}$ mit Hilfe des Störungsparameters regularisiert, und die Eigenwerte in (4.43) werden durch die Eigenwerte

$$\lambda_{\iota' m'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu, \epsilon') \quad , \epsilon' \in \mathbb{R} \tag{4.43'}$$

ersetzt, siehe Mbaeyi [F-20]

Die Übergänge zwischen den Stellen A, B, C, und D (Abb. 3.11), die stets die dazwischen liegenden instabilen Zustände durchläufen, bedeuten, daß die Eigenwerte in (4.43) ihre Zusammensetzung ändern. Aber zuerst soll eine Zusammensetzung von (4.43) gefunden werden, die allen Anforderungen eines Flip-Flops gerecht werden. Hierzu

$$\lambda_{\iota' m_1'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) = 0 \qquad m_1' = 1, \ldots, N' \geq 0 \tag{4.44}$$

$$\text{Im}\,\lambda_{\iota' m_2'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) \neq 0 \quad \text{Re}\,\lambda_{\iota' m_2'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) \leq 0$$
$$m_2' = 1, \ldots, N'' \quad , \quad \boxed{N'' \geq 1} \tag{4.45}$$

$$|\text{Im}\,\lambda_{\iota' m_3'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu)| \geq 0 \quad , \text{Re}\,\lambda_{\iota' m_3'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) > 0$$
$$m_3' = 1, \ldots, N''' \qquad \boxed{N''' \geq 0} \tag{4.46}$$

$$\text{Re}\,\lambda_{i m'_4}(\tau,\eta,\sigma,D,\mu) \neq 0 \qquad \text{Im}\,\lambda_{i m'_4}(\tau,\eta,\sigma,D,\mu) = 0$$

(4.47) $\quad m'_4 = 1, \dots, N^{IV}, \quad N^{IV} \geq 0, \quad N^{III} + N^{IV} \geq 0$

$$N^{III} + N^{IV} = N_1 - (N' + 2N'') \quad \text{bzw.} \quad 2N'' + N^{IV} = N_1 - (N' + 2N'')$$

Die Begingungen (4.44) bis (4.47) sind die notwendigen Bedingungen dafür, daß System von Typ (4.34) bis (4.37) mit den Matrizen (4.40) fast periodische Lösungen besitzen; da jede periodische Lösung zugleich als fast periodisch gilt, sind die in dieser Arbeit gesuchte Lösungsformen ('Solitary Waves', Kaptiel 3) in den Bedingungen (4.44) bis (4.47) eingebettet, sofern die periodischen bzw. fast periodischen Lösungen bezüglich des Parameters $\xi = \omega \cdot x - \nu t$ gesucht werden.

Bezeichne die zwei stabile Zustände eines Flip-Flops durch S(1) bzw S(-1), und den instabilen durch S(o). Diese Zustände, repräsentativ durch die Lage der entsprechenden Eingenwerte auf der komplexen Ebene $\mathbb{C}$ dargestellt, entprechen einer der Alternativen in Abb. 4.1:

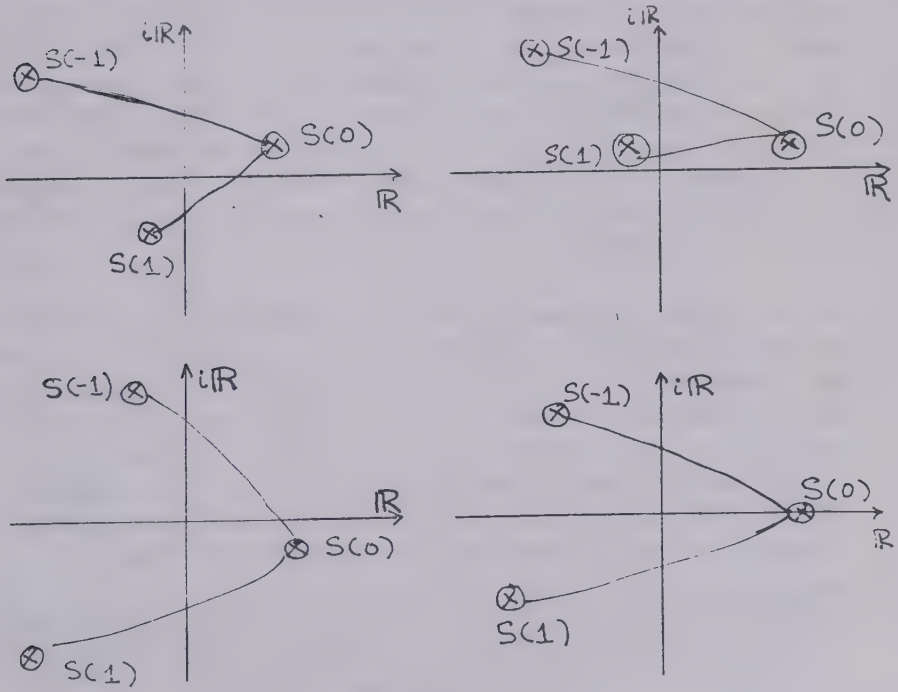


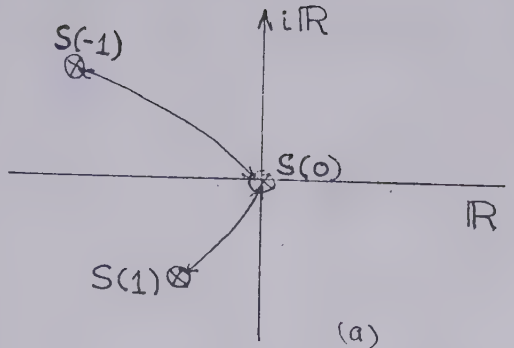
Abb. 4.1

In allen dieser Alternativen in Abb. 4.1. erzeugt die Lage des Zustandes S(o), jenach Größe von $|Re\lambda_{l'm'}|$ Steuerungsprobleme; die Ausschaltung der durch $Re\lambda_{l'm'} > 0$ erzeugte Instabilitäten setzten eine sichere Stabilizierbarkeit des Systems voraus, siehe z. B. Kalman et al N-9 , Lee + Markus A-37 für den Begriff der Stabilizierbarkeit. (Mit $|Re\lambda_{l'm'}| >> 1$ gilt ein System gewöhnlich als steif, wobei "$>>$" wesentlich, um vielfaches großer als bedeutet).

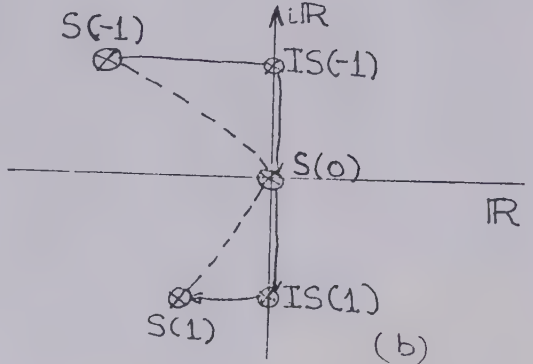
Diese Schwerigkeiten werden durch folgende einschränkende Betrachtungen umgegangen, Abb. 4.2. In Abb. 4.2a sind die Lage der Grundzustände S(1), S(o), und S(-1) eines Flip-Flops, stellvertretend durch die Lage der Eigenwerte dargestellt (siehe Abb. 4.1). Da für die direkten Ansteurungen $S(-1) \rightleftarrows S(o) \rightleftarrows S(1)$ ein schärfer Verhaltensübergang beim $\lambda_{l'm'} = 0$ vorliegt, werden zwei Ziwschenzustände IS(-1) und IS(1) eingeschaltet. Daraus ergibt sich Abb. 4.2b. Aber die Existenz eines instabilen Zustandes ist eine charakteristische Eigenschaft eines Flip-Flops; dieser entsprechend, wird ein Weg von IS(-1) oder IS(1) zu S(o) (und umgekehrt) gewählt, der so beschaffen ist, daß zwar $Re\lambda_{l'm'} > 0$ gilt, aber zugleich $|Re\lambda_{l'm'}| < 1$ klein gehalten wird. Dies enstpricht einer Störungsrechnung für $\lambda_{l'm'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu, \epsilon')$ (siehe Anmerkung 4.17) und liefert Abb. 4.2c; es bedeutet, daß leichte Destabilizierung (Erzeugung von Instabilitäten) angewandt wird, um das System von oder zu dem Zustand S(o) zu steuern (vgl. Wege der Konditionierung in §3.3).

Je nach dem wie S(o) verlassen oder angesteuert wird, sind auch die direkte Wege $S(o) \rightleftarrows S(1)$ oder $S(o) \rightleftarrows S(-1)$ denkbar, siehe Abb. 4.3 - eine Vergrößerung der durch das Rechteck in Abb. 4.2c dargestellte Umgebung von S(o). Sie zeigt, daß sich das Ansteuern von oder zu S(o), ausgehend von IS(-1) oder IS(1), in eine Rückkehr zum Ausgangszustand S(-1) oder S(1) verwandeln konnte. (Dies ist wiederum ein weitführendes Steuerungsproblem, das nicht in Rahmen dieser Arbeit behandelt werden kann).

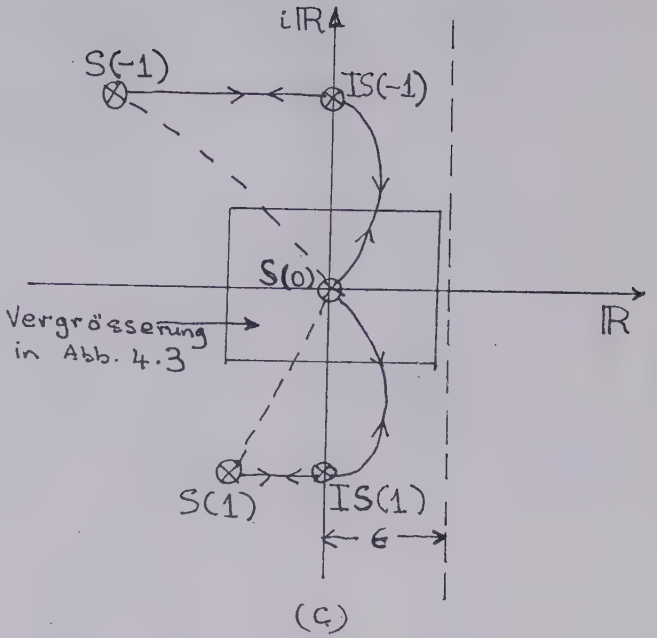
ANMERKUNG 4.18: Abb.4.2c zeigt Züge des '5-State-Automat-Prinzips für Evolutionsvorgänge, Kapitel 2. In dieser Abbildung ist deutlich zu sehen, daß $S(-1) \leftrightarrow IS(-1) \leftrightarrow S(o) \leftrightarrow IS(1) \leftrightarrow S(1)$ ein Vorgang mit 8 Phasen ist, vgl mit Anwendung des '5-State-Automat-Prinzip' für die Fortpflanzung des Nervenimpulses, Kap. 2.


S(-1)
iℝ
S(0)
ℝ
S(1)

(a)

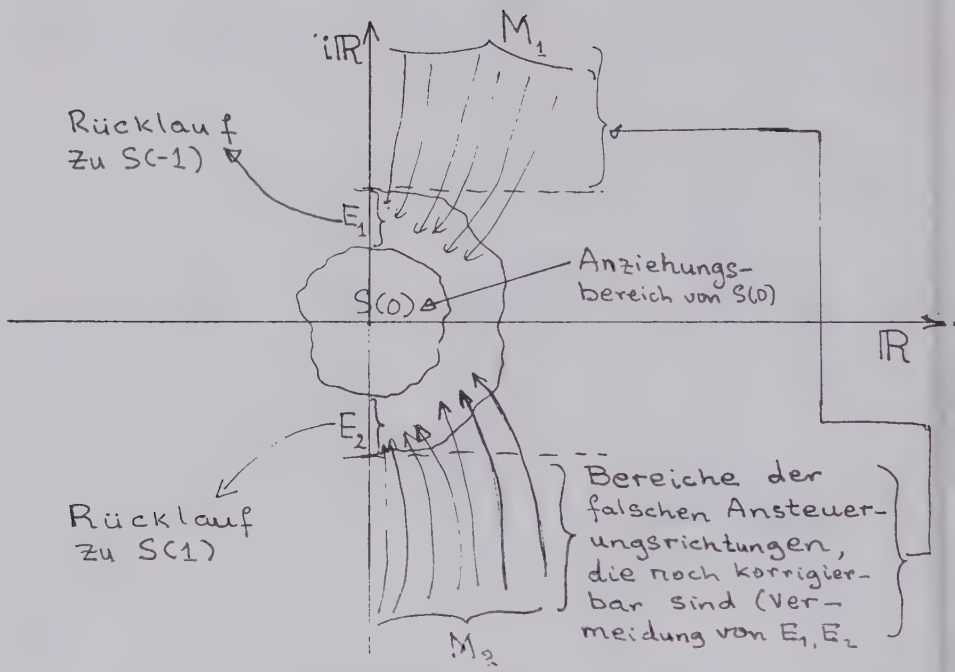

S(-1)
iℝ
IS(-1)
S(0)
ℝ
S(1)
IS(1)

(b)


iℝ
S(-1)
IS(-1)
S(0)
ℝ
Vergrösserung
in Abb. 4.3
S(1)
IS(1)
ε

(c)

Abb. 4.2



E_1 , E_2 - Einfallsbereiche, die ausserhalb der Anziehungsumgeung von S(o) liegen; die falsche Ansteuerung kann ggf nicht mehr korrigiert werden, und es folgt ein Rücklauf zum Ausgangszustand S(-1) oder S(1).

M_1 , M_2 - Schar der möglichen Ansteurungen, von IS(1) bzw IS(-1) ausgehend.

Abb. 4.3

Die Zusammensetzung von Eigenwerten wie in (4.44) bis (4.47) erfüllt alle Voraussetzungen für das hier gesuchte chemische System (siehe Kapitel 1 und 2):

a) Die Eigenwerte von Typ (4.44) sind die klassische Voraussetzung für Turing-Verhalten, d.h. Flip-Flop, siehe z. b. Seelig [A-61] Turing [A-67].

b) Die Eigenwerte von Type (4.45) und (4.46) sind Voraussetzungen für stabile bzw instabile periodische Lösungen bezüglich $\{ = \omega \cdot x - \nu t$ (Die gesuchten 'Solitary Waves', Kap. 3, setzten periodische Lösungen bzgl $\{ = \omega \cdot x - \nu t$ voraus, siehe Kopell und Howard [F-11]). Zugleich kennzeichnen sie

die Möglichkeit der Abwechselung zwischen stabilen und instabilen Zuständen, und somit die Möglichkeit der hier gesuchten Übergänge als Voraussetzung für Konditionierbarkeit (Kapitel 3).
Mit anderen Wörten: Das Verhältnis zwischen N'' und N''' ist entscheidend dafür, ob stabile oder instabile Zusände vorwiegen; diese Feststellung wird an Hand der Hierarchie $(e, \rho) \longleftrightarrow (e_i, \rho_i) \longleftrightarrow (e_{ij}, \rho_{ij})$ in §4.2.3 unten näher erläutert.

Mit Hilfe der Poincare-Bendixsonschen Phasenraumabbildung für periodische Lösungen erhalten wir folgendes Bild für Konditionierbarkeit:

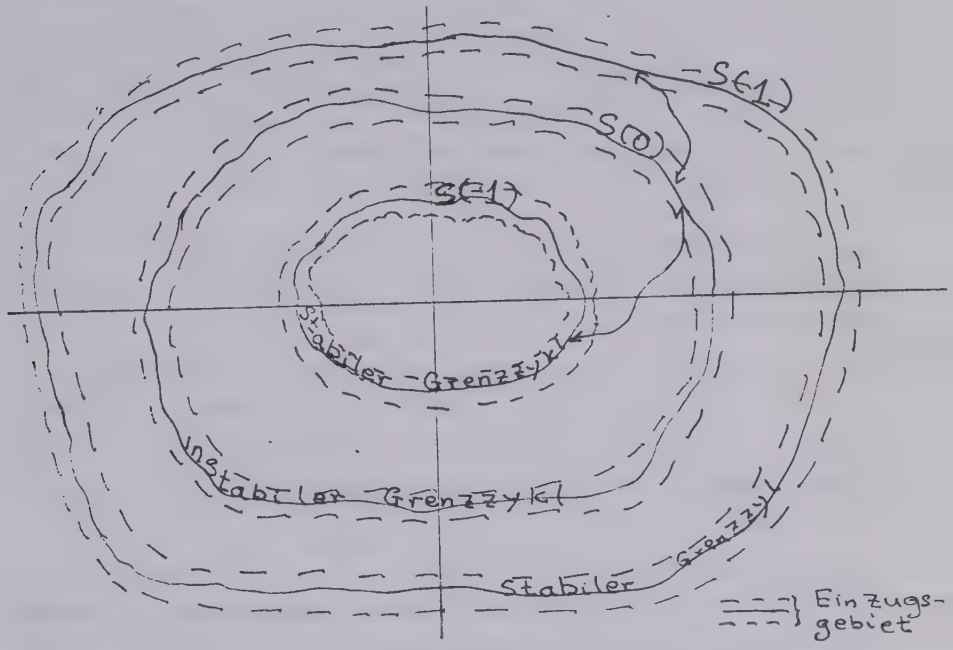


Abb. 4.4

Die Erzeugung von Übergänge zwischen den Grenzzyklen entspricht der hier gemeinten Konditionierbarkeit.
Mit anderen Wörten: Konditionierbarkeit eines chemischen Systems setzt die Variabilität der Zusammenstezung von Eigenwerten, wie in (4.44) bis (4.47) voraus.

4.2.2 DIE DURCH EIGENWERTE DEFINIERTE TRANSFORMATIONEN FÜR ENTWICKLUNGSSYSTEME

Da Flip-Flop ein Grundprinzip der Evolution ist, siehe §2.2.5, besitzt jedes Element der Hierarchie $(e,\rho) \longleftrightarrow (e_i,\rho_i) \longleftrightarrow (e_{ij},\rho_{ij})$ die Fähigkeit des Umkippens, und somit die drei Zustände S(1), S(o) und S(-1). Daher gilt für jedes Element der Hierarchie Eigenwertzusammensetzung wie in (4.44) bis (4.47). Geht man vom makroskopischen ins mikroskopische, so ergibt sich folgende Situation: Jeder der drei Zustände S(1), S(0) oder S(-1) eines Turing-Prozesses als ganzes gesehen, setzt sich zusammen als das Gleichgewichthalten von den Unterprozessen (e_i,ρ_i), (e_{ij},ρ_{ij}) die selbst, als einzelne Prozesse, sich in einer der Zustände S(1), S(o) oder S(-1) befinden konnten. Das makroskopische Bild eines Prozesses (≡Verhalten eines Prozesses als eine ganze Einheit) ist daher als gewisse Permutationen der N interagierenden Prozesse zu verstehen, wobei jedem der Komponente mit drei wahrscheinlichen Zuständen S(-1), S(o), S(1) versehen ist.

Diese gleichzeitige Betrachtung der makroskopischen und mikroskopischen Aspekte eines Prozesses wird folgendermassen zusammengefegügt. Definiere durch

$$S^* \triangleq \{S(-1), S(o), S(1)\} \tag{4.48}$$

die Menge der (makroskopischen) stationären Zustände eines Flip-Flop-Prozesses. Die Übergänge zwischen diesen Zuständen entspricht der Abbildung

$$\lambda_{eva} : S^* \times \tilde{I} \longrightarrow S^* \tag{4.49}$$

$\tilde{I} \subseteq U \subset \mathcal{U}$ (siehe Bezeichnungen u. Symbole)

-diese Abbildung ist der Abbildung ähnlich, die die Abbildung eines Automats in sich definiert (siehe Anhang §A1), so daß man in Hinblick auf diese Übergänge von 'Evolutionsautomat' sprechen kann. Aber der makroskopische Zustand eines Prozesses (d.h. das Verhalten als ganzes) setzt sich aus einer Kombination verschiedener interner (mikroskopischen) Zustände zusammen; im Sinne der in dieser Arbeit eingesetzten hierarchischen Gliederung sind diese die Hierarchieebenen, die durch (e_i,ρ_i), (e_{ij},ρ_{ij}) usw definiert sind. Daher gilt

(4.50) $$\underbrace{S^* \times \cdots \times S^*}_{N\text{- Mal}} \longrightarrow S^*$$

Daraus resultiert

(4.51) $$\lambda_{eva} : \sum_{j'=1}^{N} (S^*_{j'} \times \tilde{I}_{j'}) \longrightarrow S^*$$
$$= \times \lambda^{-1}_{eva,j'} (S^*_{j'}) \longrightarrow S^*$$
$$\lambda_{eva,j'} = S^*_{j'} \times \tilde{I}_{j'} \longrightarrow S^*_{j'}$$

dabei ist $\tilde{I}_{j'}$ die Beschränkung von $\tilde{I}$ auf den j'-ten Prozess. Komponentenweise Beeiflüssung der Vorgänge ist dann durch folgenden Schritt erreichbar: Konstruiere Funktionen $(\mathring{\chi}_1, \ldots, \mathring{\chi}_{N-1})$ die derart beschaffen sind, daß die invertierbare Abbildung

(4.52) $$(\mathring{\chi}_1, \ldots, \mathring{\chi}_{N-1}) \longrightarrow \mathring{\chi}$$

existiert. Wenn dies gegeben ist, ergibt sich aus (4.51)

(4.53) $$\lambda_{eva} : \sum_{j'=1}^{N} (S^*_{j'} \times \tilde{I}_{j'}) \longrightarrow \mathring{\chi}(S^*_1, \ldots S^*_N)$$
$$\times \lambda_{eva,j'} (S^*_{j'}) \longrightarrow \times \mathring{\chi}_{j'}$$

Daraus erhält man: Gesteuerte makroskopische Übergänge ergeben sich als gewisse kombinatorische Zusammensetzung von S (-1) S (o) und S (1); wobei

(4.54) $$S^* \times \tilde{I} \subset \times (S^*_{j'} \times \tilde{I}_{j'}) \quad |S^*| = |S^*_{j'}|$$

Die Veränderbarkeit dieser Permutationen entspricht der Veränderbarkeit der Kombination $N = N' + 2N'' + 2N''' + N^{IV}$ für die entsprechenden Eigenwerte, siehe (4.44) bis (4.47); dabei ist offenbar, daß die Beziehung unten diesen Zahlen, vor allem zwischen N'' und N^{IV} die Bedingung dafür definiert, ob der Zustnd S (-1) , S (o) , oder S (1) dominiert, siehe §4.2.3 unten.

ANMERKUNG 4.19: Im Zusammenhang mit (4.52) wird an die Überlegungen errinert, die zu den Identitäten (2.8) und (2.9) führten.

Als nächstes wird die Menge

(4.55) $$\tilde{S} \triangleq \{S(-1), IS(-1), S(o), IS(1), S(1)\}$$

betrachtet, siehe Abb. 4.2. Die Abbildung

$$\tilde{S} \times \tilde{\tilde{I}} \longrightarrow \tilde{S}, \quad \tilde{\tilde{I}} \subsetneq \mathcal{U} \subset \mathcal{U} \tag{4.56}$$

definiert ein Entwicklungssystem, siehe Anhang §A1; für ihre Anwendung als Konditionierungsinstrument gemäß Abb. 4.2 bzw Kap. 3, ergibt sich folgende Spezialisierung davon

$$\underbrace{S^* \times \tilde{I} \underset{\leftarrow}{\overset{\lambda_{ens}}{\rightarrow}} \tilde{S}_1 \underset{\leftarrow}{\overset{\sigma_{ens}}{\rightarrow}} S^*}_{\lambda_{eva}} \tag{4.57}$$

$$\lambda_{eva} = \sigma_{ens} \circ \lambda_{ens}$$

wobei

$$\tilde{S} = S^* \cup \tilde{S}_1 \tag{4.58}$$

$$\tilde{S}_1 = \{ IS(-1), IS(1) \}$$

Geht man analog wie in vorausgegangenen Erörterungen, so erhält man

$$\lambda_{eva,j'} = \sigma_{ens,j'} \circ \lambda_{ens,j'} \tag{4.49}$$

$$\lambda^{-1}_{eva,j'} = \lambda^{-1}_{ens,j'} \circ \sigma^{-1}_{ens,j'}$$

und

$$\lambda_{eva} = \bigtimes \left(\lambda^{-1}_{ens,j'} \circ \sigma^{-1}_{ens,j'} \right) S^*_{j'} \longrightarrow S^* \tag{4.60}$$

Diese formale Präzisierungen führen zu folgenden Feststellungen: Konditionierbarkeit für das in dieser Arbeit gesuchte chemische System setzt invertierbare Abbildungen voraus, und damit gewisse Reversibilität; (die Voraussetzungen dafür bilden die speziellen Beschaffenheiten der Diffusions- und Relaxationskoeffizienten, wie sie in §2.2.2 erörtert wurden). Mathematisch ist es hinreichend und notwendig zu fordern, daß offene Umgebungsmengen von S(-1), IS(-1), S(o), IS(1), S(1) in offene Umgebungsmenge abgebildet werden; dasgleiche auch für S (-1) usw.
Die hier gemeinte Reversibilität bezieht sich auf die adaptive funktionelle Fähigkeiten, zwischen verschiedenen stationären Zuständen zu schalten, aber nicht auf die Reversibilitätsprobleme im thermodynamischen Sinne, deren Gültigkeit bei allen den Schaltvorgängen unberührt bleibt.

4.2.3: PERIODISCHE LÖSUNGEN DER DURCH EIGENWERTPROBLEME ABGELEITETEN ZUSTANDSGLEICHUNGEN

Periodische Lösungen bzgl $\xi = \omega \cdot x - \nu t$ sind die Voraussetzungen für die in Kap. 3 gesuchten SOWA-Wellen ('Solitary Waves'). Hier sollen die Bedingungen dafür, und deren Konsequenzen erörtert werden.

Bis auf die Ungleichheitszeichen, sind die Ungleichungen (4.34) bis (4.37) ähnlich strukturiert. Es genügt daher die Aufmersamkeit auf ein beliebiges Paar zu beschränken.

Unter Voraussetzung der Eigenwertzusammensetzung wie in (4.44) bis (4.47) lässt sich jedes Paar der Ungleichungen (4.34) bis (4.37) in folgende Form transformieren, siehe Malkin [F-16] Mitropolski [F-21] :

$$
\begin{aligned}
\dot{\tilde{\Psi}}_{1m_1'} &\geqslant -\epsilon' \tilde{\Psi}_{1m_1'} + \tilde{g}_{1m_1'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu, \epsilon') \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{1m_2'} &\geqslant \mathrm{Re}\lambda_{1m_2'} + \mathrm{Im}\lambda_{1m_2'} + \tilde{g}_{1m_2'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{1m_2''} &\geqslant -\mathrm{Im}\lambda_{1m_2''} + \mathrm{Re}\lambda_{1m_2''} + \tilde{g}_{1m_2''}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu),\ m_2' = m_2'' \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{1m_3'} &\geqslant \mathrm{Re}\lambda_{1m_3'} + \mathrm{Im}\lambda_{1m_3'} + \tilde{g}_{1m_3'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{1m_3''} &\geqslant -\mathrm{Im}\lambda_{1m_3''} + \mathrm{Re}\lambda_{1m_3''} + \tilde{g}_{1m_3''}(\tilde{\Psi}_2, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu),\ m_3' = m_3'' \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{1m_4'} &\geqslant \mathrm{Re}\lambda_{1m_4'} + \tilde{g}_{1m_4'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)
\end{aligned}
\tag{4.61}
$$

und

$$
\begin{aligned}
\dot{\tilde{\Psi}}_{2m_1'} &\leq -\epsilon'' \tilde{\Psi}_{2m_1'} + \tilde{g}_{2m_1'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{2m_2'} &\leq \mathrm{Re}\lambda_{2m_2'} + \mathrm{Im}\lambda_{2m_2'} + \tilde{g}_{2m_2'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{2m_2''} &\leq -\mathrm{Im}\lambda_{2m_2''} + \mathrm{Re}\lambda_{2m_2''} + \tilde{g}_{2m_2''}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)\ m_1' = m_2'' \\
\dot{\tilde{\Psi}}_{2m_3'} &\leq \mathrm{Re}\lambda_{2m_3'} + \mathrm{Im}\lambda_{2m_3'} + \tilde{g}_{2m_3'}(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)
\end{aligned}
\tag{4.62}
$$

$$\dot{\tilde{\psi}}_{2m_3''} \leq -\mathrm{Im}\,\lambda_{2m_3''} + \mathrm{Re}\,\lambda_{2m_3''} + \tilde{g}_{2m_3''}(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu), m_3' = m_3''$$

$$\dot{\tilde{\psi}}_{2m_4'} \leq \mathrm{Re}\,\lambda_{2m_4'} + \tilde{g}_{2m_4'}(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)$$

Die Formen der Ungleichungen (4.61) und (4.62) sind störungsrechnerische Formen der Transformationsideen von Malkin bzw. Mitropolski, siehe Mbaeyi [F-20] und auch Kap. 5.

Mit Hilfe von Funktionen derart

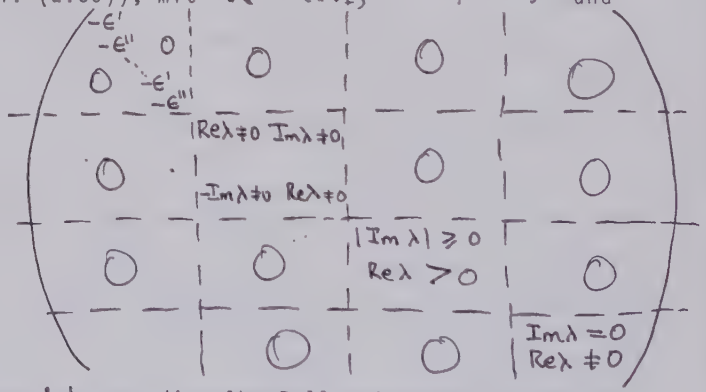
(4.63)
$$W_{j'}(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) \geq 0, \quad \sum(j_1' + j') = N$$
$$W_{j_1'}(\tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_2, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) \leq 0 \quad j', j_1' = 1, \ldots, N$$

wird jede der Ungleichungssysteme (4.61), (4.62) in eine Gleichung von Typ

(4.64) $$\dot{X} = MX + G(X, \tau, \eta, \sigma, D, \mu) + W(X, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)$$

umgewandelt (vgl. (2.36)), mit $W = (W_1, \ldots, W_N)^T$ und

(4.65) $M =$



Hier spielen die $W_{j'}$ dieselbe Rolle wie die u_s bei der Umwandlung von $\partial\rho/\partial t \geq 0$ in $\partial\rho/\partial t + u = 0$, siehe Kapitel 3, (3.29) bis (3.38); somit beziehen sie sich auf die zulässigen Steuerungsfunktionen, siehe Kap. 3, §3.4.

Sowohl in (4.61), (4.62) als in (4.64) genügen die nichtlinearen Glieder $\tilde{g}_{\iota'}$, $\iota' = 1, 2, 3, k$ usw, bzw. $G(X, \tau, \eta, \sigma, D, \mu)$ ähnliche Bedingungen wie in (4.38).

ANNAHME 4.20: $W \equiv (W_1, \ldots, W_N)^T$ sei beschränkt für alle $\xi \in [0,1]$. Das heisst $\|W\| < +\infty$

($\|\cdot\|$ bedeutet hier euklidische Norm auf $\mathbb{R}^N$).

SATZ 4.21: Angenommen, $\tilde{g}$, bzw G genügt bis auf konstante Faktoren einer ähnlichen Bedingung wie in (4.38), und es gilt die Annahme 4.20, dann besitzt das System (4.64) fast periodische Lösungen. Sie sind periodisch wenn

(4.66)

a) $\operatorname{Re}\lambda_{j'}(\tau, \eta, \sigma, D, \mu) < 0 \qquad 0 < j' \leq N$

b) $\dfrac{\bar{\omega}_{j'}(\mu^*)}{\bar{\omega}_{j''}(\mu^*)} \in Q \qquad j' \neq j'' \;,\; j', j'' = 1, \ldots, N \qquad \mu^* \in \mathbb{R}^k$

wobei $\omega_{j'}(\mu^*)$ die Periode der einzelnen Komponenten von X sind.

(Im Satz 4.21, Q ist die Menge der rationalen Zahlen, siehe Bezeichnungen und Symbole dieser Arbeit).

Beweis: Für die fast periodische Lösungen , siehe Mbaeyi [F-20] Für die Bedingungen in (4.66), insbesondere (4.66b) bzgl. der Existenz periodischen Lösungen wird auf Nemytskii + Stepanov [F-22] verwiesen.

Über die Bestimmung der Perioden $\bar{\omega}_{j'}(\mu^*)$ wird erst in Kapitel 5 eingegangen.

Es sei $\bar{I}(\mu^*)$ die Menge der $\mu^* \in \mathbb{R}^k$ für die stationäre Zustände existieren; dann nach den vorausgegangen Erörterungen ist $|\bar{I}(\mu^*)| = \tilde{K}$, , $\tilde{K} \geq 3$ eine Voraussetzung for die Konditionierungsabläufe, wie sie in Kapitel 3 und 4 besprochen wurden.
Es sei $\mu^*_s \in \bar{I}(\mu^*)$, $s = 1, 2, \ldots \tilde{K}$. Dann gilt

SATZ 4.22: Die periodischen Lösungen des Satzes 4.21 sind eindeutig verschieden, dann und nure dann, wenn

(4.67) $$\frac{\bar{\omega}_{j'}(\mu^*_s)}{\bar{\omega}_{j'}(\mu^*_{s'})} \in \mathbb{R} \setminus Q \qquad s \neq s' \qquad s, s' = 1, 2, \ldots, \tilde{K}$$

$\mathbb{R} \setminus Q \triangleq$ Menge der irrationalen Zahlen.

Beweis: Siehe Nemytskii + Stepanov [F-22] ; (4.67) oben entspricht der Forderung für die Existenz von eindeutig verschiedenen

Trajektorien auf einem Torus

(Für den Begriff der Trajektorien wird gleichsam auf Nemytskii + Stepanov [F-22] verwiesen).

ANMERKUNG 4.23: Die Bedingung (4.67) ist etwas restriktiv. Situationen sind denkbar, wo die Bedingung (4.67) nur für $j' = 1,2,$ $\ldots N^+$ gilt, aber nicht für $N^{++} = N - N^+$, und trotzdem gibt es eindeutig unterscheidbare periodische Lösungen. Dies, allerdings, ist eine weiter führende Frage, die nicht ohne nähere energetische und andere kombinatorische Betrachtungen zu lösen ist; auf eine weitere Verfolgung wird in dieser Arbeit verzichtet, da dies weit über den engeren Rahmen dieser Arbeit führt.

ZUR HERLEITUNG DES HOPF-MALKINSCHEN PROBLEMS:

Hier befassen wir uns mit der Zerlegung des Raumes $\mathbb{R}^N$, die durch die Eingenwertzusammensetzung (4.44) bis (4.47) gegeben ist. Beachte, daß die Bedingung (4.44) durch $\epsilon' \longrightarrow 0$ in der Störungsdarstellung (4.61), (4.62) bzw. (4.64) gegeben wird, siehe Mbaeyi [F-20].

Wenn $N' = 0$, und $N'' = 1$ so erhält man für das System (4.61), (4.62) bzw (4.64) die klassische Hopfsche Bifurkationsaufgabe, siehe z.B. Marsden + McCracken F-19 . Aber für die Zwischenzustände muss nicht notwendigerweise $N'' = 1$ gelten. Die Aufgabe, die durch $N' = 0$ und $N'' > 1$ entsteht, wird als das verallgemeinerte Hopfsche Bifurkationsproblem bezeichnet.

Für $N' = 1$ und $N'' = 0$ ergibt sich dagegen die klassische Malkinsche Aufgabe, siehe Malkin [F-16] ; die Aufgabe, die durch $N' \geq 1$ und $N'' \geq 0$ entsteht, beschreibt dann das allgemeine Malkinsche Problem.

Zusammenfassend ergeben sich:

DEFINITION 4.24: Die durch die Eigenwertprobleme (4.44) bis (4.47) abgeleiteten Systeme (4.61), (4.62) bzw (4.64) werden als DAS HOPF-MALKINSCHE-PROBLEM bezeichnet.

Für das Hopf-Malkinsche Problem gelten daher $N' \neq 0$ und auch $N''' \neq 0$.

LEMMA 4.25: Die durch Frage F2 gestellte Aufgabe dieser Arbeit wird vollständig durch das Hopf-Malkinsche Problem dargestellt.

Lemma 4.25 ist eine Konsequenz der Ergebnisse in §4.2.

Die Zerlegung des Raumes $\mathbb{R}^N$, die durch die Eigenwertprobleme (4.44) bis (4.47) erzeugt wird, ist:

$$\mathbb{R}^N \equiv \mathbb{R}^{N'} \oplus \mathbb{R}^{2N''} \oplus \mathbb{R}^{2N'''} \oplus \mathbb{R}^{N^{IV}} \tag{4.68}$$

Die auf $\mathbb{R}^{N'} \oplus \mathbb{R}^{2N'} \oplus \mathbb{R}^{N^{IV}}$ beschränkte Aufgabe ist die Malkinsche, und die auf $\mathbb{R}^{2N''} \oplus \mathbb{R}^{2N'''} \oplus \mathbb{R}^{N^{IV}}$ die Hopfsche.

4.3 Entwicklungssysteme als Systeme mit veränderlichen Operatoren: Lösbarkeit und Stabilität

Im letzten Abschnitt wurden die Ungleichungen bzw. Gleichungen behandelt, die die Umgebungen der Zustände S(-1), S(0) und S(1) beschreiben; in dofern als die Eigenwerte der Matrizen von Typ (4.40) bestimmt sind, und unter den in §4.2 gegebenen Voraussetzungen, sind diese Zustände numerisch berechenbar. In diesem Abschnitt wird die Erweiterung dieser numerischen Berechenbarkeit zur Erfassung der Obergangswege der Zuständen unter einander angestrebt; mit anderen Wörten: Gesucht ist eine geeignete analytische Darstellung der Übergängen $S(-1) \rightleftharpoons IS(-1) \rightleftharpoons S(0) \rightleftharpoons IS(1) \rightleftharpoons S(1)$, wobei sich die Aufmerksamkeit auf die Räume zwischen den Umgebungen dieser Zustände rochtet. Hierzu kehrt man auf die Ungleichungen von Typ (4.34) bis (4.37) zurück; durch die übliche Hinzunahme von positiven bzw. negativen Funktionen, z.B $W(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \dots)$, siehe (4.63), (4.64), werden sie die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\Psi}}_1 &= A_1\tilde{\Psi}_1 + g_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu) + W_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \dots) \\ \dot{\tilde{\Psi}}_2 &= A_2\tilde{\Psi}_2 + g_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu) + W_2(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \dots) \end{aligned} \tag{4.69}$$

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{\Psi}}_1 &= A_1\tilde{\Psi}_1 + g_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu) + W_1(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \dots) \\ \dot{\tilde{\Psi}}_2 &= A_3\tilde{\Psi}_2 + g_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \tau, \sigma, \eta, D, \mu) + W_3(\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \dots) \end{aligned} \tag{4.70}$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 = A_4\tilde{\Psi}_1 + g_4(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\tau,\sigma,\varrho,D,\mu) + W_4(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\cdots)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 = A_3\tilde{\Psi}_2 + g_3(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\tau,\sigma,\varrho,D,\mu) + W_3(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\cdots) \qquad (4.71)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_1 = A_4\tilde{\Psi}_1 + g_4(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\tau,\sigma,\varrho,D,\mu) + W_4(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\cdots)$$

$$\dot{\tilde{\Psi}}_2 = A_2\tilde{\Psi}_2 + g_2(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\tau,\sigma,\varrho,D,\mu) + W_2(\tilde{\Psi}_1,\tilde{\Psi}_2,\cdots) \qquad (4.72)$$

Mit $\Psi = (\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2)^T$, siehe die der Arbeit vorangestellten Bezeichnungen und Symbolen, hat jedes Gleichungspaar in (4.69) bis (4.72) die Vektordarstellung:

$$\dot{\Psi} = \mathcal{A}\Psi + G(\Psi,\tau,\sigma,\varrho,D,\mu) + W(\Psi,\tau,\cdots) \qquad (4.73)$$

wobei

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A_{l'} & 0 \\ 0 & A_{l'_1} \end{pmatrix} \qquad \begin{matrix} l'_1 \neq l' \\ l', l'_1 = 1,2,3,4 \end{matrix} \qquad (4.74)$$

Die Elemente $A_{l'}$, $A_{l'_1}$ der Matrix $\mathcal{A}$ beziehen sich stets auf entsprechende Matrizenpaare (A_1, A_2), (A_1, A_3) usw in den Gleichungen (4.69) bis (4.72).
Ferner sind

$$G = \begin{pmatrix} g_{l'} \\ g_{l'_1} \end{pmatrix} ; \quad W = \begin{pmatrix} W_{l'} \\ W_{l'_1} \end{pmatrix} \qquad (4.75)$$

ihre Komponente setzen paarweise zusammen, wie sie in den Gleichungen (4.69) bis (4.72) vorkommen.

Integration der Gleichung von Typ (4.73) ergibt:

$$\psi = e^{\mathcal{L}_0(\xi-\xi_0)}\psi_0 + \int_{\xi_0}^{\xi} e^{\mathcal{L}_0(\xi-\xi'')}\left[G(\psi,\tau,\ldots) + W(\psi,\tau,\ldots)\right] d\xi'' \tag{4.76}$$

Daraus ergibt sich die Operatorengleichung:

$$\psi^0 = \psi_0^0 + \psi^0 \mathcal{N}(\psi^0) \tag{4.77}$$

wobei

$$\text{a)}\quad \psi^0 = e^{-\mathcal{L}_0\xi}\psi$$

$$\text{b)}\quad \psi_0^0 = e^{-\mathcal{L}_0\xi_0}\psi_0 \tag{4.78}$$

$$\text{c)}\quad \psi^0\mathcal{N}(\psi^0) = \int_{\xi_0}^{\xi} \psi^0\left[G(\psi^0,\ldots) + W(\psi^0,\ldots)\right] d\xi''$$

$\mathcal{N}(\psi^0)$ ist eine nichtlinearer Operator.
Diese Operatorengleichung (4.77) wird mit Hilfe der Iteration

$$\psi_n^0 = \psi_0^0 + \psi_{n-1}^0 \mathcal{N}(\psi_{n-1}^0) \tag{4.79}$$

gelöst; dabei ist

$$\psi_1^0 = \psi_0^0 \tag{4.80}$$

der Anfangswert der Iteration. Daraus ergibt sich unmittelbar:

$$\mathcal{N}(\psi_0^0) = 0 \qquad \text{für } \boxed{n=1} \tag{4.81}$$

Diese Folgerung hat aufschlußreiche Interpretationen und Konsequenzen:
Um die Übergänge zu simulieren, kann der Anfangswert beliebig gewählt werden; gewöhnlich wird diese Wahl die Lösung des Hopf-Malkinschen Problems (§4.2) darstellen. Eine darartige Wahl, für die die Bedingung (8.81) erfüllt ist, stellt die Verteilung der

stationären Zustände in Raum-Zeit da, siehe (4.78c) oben. Ausserhalb der Bereiche der stationären Zustände bedeutet die Verteilung der (äquivalenten) Übergangswege in Raum-Zeit. Wegen (4.78c) enthält $\mathcal{N}(\psi^0)$ unter anderen die nichtlinearen Glieder, die die chemische Kinetik definieren. Falls die Iteration (4.79) den Übergang von einem stationären Zustand zu einem anderen darstellt, dann ist die Umkehrung dieses Übergangs nur möglich, falls $\mathcal{N}(\psi^0_{n-1})$ (als Projektionsoperator betrachtet) invertierbar ist, siehe unten. Diese Invertierbarkeit, auf die nichtlineare Glieder für chemische Kinetik übertragen, bedeutet eine Forderung nach reversiblen chemischen Kinetiken für Konditionerbarkeit (siehe Kapitel 3 dieser Arbeit).

Es sei angenommen, daß der Anfangswert ψ^0_0 der Iteration (4.79) die Lösung der IGL für das Hopf-Malkinsche Problem des stationären Zustandes ist, siehe Kapitel 5 unten; (dafür sind die Matrizen $A_{L'}$ und $A_{L'_1}$ in (4.74) von Typ (4.40)). Mit diesem Anfangswert ergibt sich eine der folgenden Alternativen; entweder

$$\|\psi^0_n - \psi^0_0\| < \bar{\epsilon} \quad , \quad \bar{\epsilon} \longrightarrow 0 \quad n \longrightarrow +\infty \tag{4.82}$$

- der stationäre Zustand ist stabil, oder

$$\|\psi^0_n - \psi^0_0\| > \bar{\bar{\epsilon}} \quad \bar{\bar{\epsilon}} > 0 \quad , \quad n \longrightarrow +\infty \tag{4.83}$$

- der stationäre Zustand ist instabil bzw. er kann destabilisiert werden, in dem Sinne, dass der zur Betrachtung stehende Prozess aus dem Stabilitätsbereich dieses stationären Zustandes herausgesteuert werden kann.

Wir nehmen an, der 2. Fall tritt ein, und der zur Betrachtung stehende Prozess kann dadurch zu einem neuen stabilen stationären Zustand überführt werden. Bezeichne mit $\psi^{0(1)}_0$ den Ausgangszustand, für den (4.83) gilt, und mit $\psi^{0(2)}_0$ den Zielzustand (einen neuen stabilen stationären Zustand). Die aus (4.83) abgeleitete Konsequenz oben bedeutet

$$\psi^{0(1)}_0 + \psi^{0(1)}_{n-1} \overline{\mathcal{N}}\left[\psi^{(0)(1)}_{n-1}\right] = \psi^{0(2)}_0 \tag{4.84}$$

Dann gilt

(4.85) $\| \psi_n^{o(1)} - \psi_o^{o(2)} \| < \tilde{\tilde{\epsilon}} \qquad \tilde{\tilde{\epsilon}} \longrightarrow 0 \,, \; n \longrightarrow +\infty$

Aber

(4.86) $\| \psi_n^{o(1)} - \psi_o^{(2)} \| \leq \| \psi_n^{o(1)} - \psi_{n'}^{o(2)} \| + \| \psi_{n'}^{o(2)} - \psi_o^{o(2)} \|$

(Dreiecksungleichungen für Normen, siehe z. B. Simmons [F-23])
Aber, da der Zielzustand $\psi_o^{o(2)}$ als stabil zu gelten hat, gilt für die Iteration

(4.87) $\psi_{n'}^{o(2)} = \psi_o^{o(2)} + \psi_{n'-1}^{o(2)} \mathcal{N}'(\psi_{n'-1}^{o(2)})$

(vgl. (4.81)) in einer geeigneter Umgebung von $\psi_o^{o(2)}$ die Eigenschaft

(4.88) $\| \psi_{n'}^{o(2)} - \psi_o^{o(2)} \| < \epsilon'', \; \epsilon'' \longrightarrow 0 \,, \; n' \longrightarrow +\infty.$

Somit ist

(4.89) $\| \psi_n^{o(1)} - \psi_{n'}^{o(2)} \| \longrightarrow 0 \,, \; n \longrightarrow +\infty$

die Bedingingung dafür, daß stationäre Zustände in einander überführbar sind.

Der Anfangswert $\psi_o^{o(1)}$ selbst muß auch durch Iteration bestimmt werden; daher ist die vollständige Iteration für $\psi^{o(1)}$ die doppelte Iterationen

(4.90)
$$\psi_{nm}^{o(1)} = \psi_{o,m}^{o(1)} + \psi_{n-1,m}^{o(1)} \mathcal{N}(\psi_{n-1,m}^{o(1)})$$
$$\psi_{o,m}^{o(1)} = \tilde{\tilde{T}}_m^{(1)} \psi_{m-1}^{o(1)} \,, \quad \tilde{\tilde{T}}_m^{(1)} \text{ ein Operator}$$

Für $\psi^{o(2)}$ sind

(4.91)
$$\psi_{n'm'}^{o(2)} = \psi_{o,m'}^{o(2)} + \psi_{n'-1,m'}^{o(2)} \mathcal{N}'(\psi_{n'-1,m'}^{o(2)})$$
$$\psi_{o,m'}^{o(2)} = \tilde{\tilde{T}}_{m'}^{(2)} \psi_{m'-1}^{o(2)} \,, \quad \tilde{\tilde{T}}_{m'}^{(2)} \text{ ein Operator}$$

die entsprechenden doppelten Iterationen.
Die Bedingung (4.89) lautet nun

$$\| \psi^{\circ(1)}_{nm} - \psi^{\circ(2)}_{n'm'} \| \longrightarrow 0 \tag{4.92}$$

wobei $\| \psi^{\circ(1)}_{nm} - \psi^{\circ(1)}_{o} \|$, für $m \longrightarrow \infty$ einer Bedingung von Typ Typ (4.83) genügt, während $\| \psi^{\circ(2)}_{n'm'} - \psi^{\circ(2)}_{o} \|$, für $n', m' \longrightarrow + \infty$ eine Bedingung von Typ (4.82) befriedigt.

Zusammenfassend erhalten wir:
Es seien $\psi^{\circ(1)}_{o}$, $\psi^{\circ(2)}_{o}$ Lösungen der Hopf-Malkinschen Probleme für stationäre Zustände; wenn sie existieren, sind sie stets beschränkt. Somit gilt

$$\mathring{k} = \sup \| \psi^{\circ(2)}_{o} - \psi^{\circ(1)}_{o} \| < + \infty \tag{4.93}$$

und

$$\mathcal{M}_1(\psi^\circ) \triangleq \left\{ \psi^\circ \,\middle|\, \| \psi^{\circ(2)}_{o} - \psi^{\circ(1)}_{o} \| \leq \mathring{k} \right\} \tag{4.94}$$

ist eine beschränkte Menge.
Aufgrund der Eigenschaften, die den Diffusions- und Relaxationskoeffizienten zugeordnet sind (§2.2.2, APTC-1 bis APTC-6) sind

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_2(\psi^\circ) &\triangleq \left\{ \psi^\circ \,\middle|\, \| \tau(\psi^\circ) \| < + \infty \right\} \\ \tilde{\mathcal{M}}_3(\psi^\circ) &\triangleq \left\{ \psi^\circ \,\middle|\, \| D(\psi^\circ) \| < + \infty \right\} \end{aligned} \tag{4.95}$$

auch beschränkte Mengen. Dann ist

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}) \triangleq \left\{ \psi^{\circ\prime} \,\middle|\, \psi^{\circ\prime} \in (\mathcal{M}_1 \cap \tilde{\mathcal{M}}_2 \cap \tilde{\mathcal{M}}_3) \right\} \tag{4.96}$$

($\mathcal{D}(\mathcal{A})$ der Definitionsbereich des Operators $\mathcal{A}$) ist eine beschränkte Menge, siehe Annahme 4.26.

Mit der Standardbezeichnung P_n für Projektionsoperator, siehe Krasnoselskii et al [F-12] , Kurpel [F-13] , lassen sich die Iterationsgleichungen (4.90a) und (4.91a) folgendermassen umschreiben:

(4.97)
$$\psi^{o(1)}_{n,m} = \psi^{o(1)}_{o,m} + \psi^{o(1)}_{n-1,m} P_n \psi^{o(1)}_{n-1,m}$$
$$\psi^{o(2)}_{n',m'} = \psi^{o(2)}_{o,m'} + \psi^{o(2)}_{n'-1,m'} P'_{n'} \psi^{o(2)}_{n'-1,m'}$$

Daraus ergibt sich

(4.98)
$$(\psi^{o(1)}_{n,m} - \psi^{o(2)}_{n'm'}) = (\psi^{o(1)}_{o,m} - \psi^{o(2)}_{o,m'}) + (\psi^{o(1)}_{n-1,m} P_n \psi^{o(1)}_{n-1,m} - \psi^{o(2)}_{n'-1,m'} P'_{n'} \psi^{o(2)}_{n'-1,m'})$$

Offenbar ist $(\psi^{o(1)}_{om} - \psi^{o(2)}_{om'}) \simeq \text{const}$ und $\psi^{o(1)}_{n,m}$ $\longrightarrow \psi^{o(2)}_{n',m'}$ wegen (4.84). Ferner, $n \gg n'$ ist eine notwendige Voraussetzung dafür, dass die Bedingung (4.89) bzw. (4.92) erfüllt werden; für das weitere wird n' durch n ersetzt. Somit ist

(4.99)
$$(\psi^{o(1)}_{n-1,m} P_n \psi^{o(1)}_{n-1,m} - \psi^{o(2)}_{n-1,m'} P'_{n'} \psi^{o(2)}_{n-1,m'}) \simeq \text{const}$$

die Iterationsgleichung, die es erfüllen gilt, wenn Zustände (im Sinne der Konditionerbarkeit) in einander überführbar werden. Diese Ergebnisse führen zu folgendem

SATZ 4.27: Die Operatorengleichung (4.99) besitzt eine durch

(4.100)
$$P_n \psi^{o(1)}_{n,m} \longrightarrow P'_n \psi^{o(2)}_{n,m'} + \text{Const}\,, \quad n \to +\infty$$

definierte Lösung $\psi^{o(2)}_o$ dann und nur dann, wenn $P_n \psi^{o(1)}_{n,m}$ ein monoton steigender Operator ist, während $P'_{n'} \psi^{o(2)}_{n',m'}$ kontrahierend ist, und ferner

(4.101)
$$d(P_n \psi^{o(1)}_{n,m}, P'_{n_1} \psi^{o(2)}_{n,m'}) < d(\psi^{o(1)}_o, \psi^{o(2)}_o)$$
$$d(P_n \psi^{o(1)}_{n,m}, \psi^{o(1)}_o) > a_m$$
$$d(P'_n \psi^{o(2)}_{n,m'}, \psi^{o(2)}_o) < b_{m'}$$

Dabei ist $d(\cdot,\cdot)$ eine Metrik auf der Menge $\mathfrak{D}(\psi)$, a_m eine monoton steigende und $b_{m'}$ eine monoton abnehmende Funktion auf derselben Menge ist. Diese Lösung ist im Sinne von beschränkt sein stets stabil.

$a(\psi)$ ist monoton steigend, wenn $a(\psi_1) > a(\psi_2), \psi_1 > \psi_2$ (vgl. (4.83)), und $a(\psi)$ ist kontrahierend, falls $|a(\psi_1) - a(\psi_2)| < |(\psi_1 - \psi_2)|$ (vgl. (4.82)).
Eine Funktion auf der Menge $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ heisst monoton steigend, falls $a(\psi_1) > a(\psi_2)$ für alle $\psi_1 > \psi_2 \cdot \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ mit Umkehrung des Ungleichheitszeichen ergibt sich eine monoton absteigende Funktion.

Die erste Bedingung in (4.101) ist eine Majorant für alle zulässige Fehlerbereiche. Für eine bessere Kontrolle der Abweichungen der Iterationen, ist es zweckmässiger, diese Bedingung durch eine Abbildung ρ auf der Menge von Metriken zu ersetzen, die sich aus der Zuordnung ergeben, daß jedem Schritt der Iteration eine neue Metrik zugeordnet wird. Durch Zuordnung für jeden Schritt entsteht eine variable Metrik, auf deren Menge die Abbildung deklariert wird; allerdings ist $d(\psi_o^{o(2)}, \psi_o^{o(1)})$ in Satz 4.27 stets eine Majorante für diese Abbildung, siehe Kurpel [F-13]

P_n bzw P_n' sind beschränkt, da sie stetige Operatoren auf einer beschränkten Menge ($\mathcal{D}(\mathcal{A})$) sind. Sie sind somit auch invertierbar. So daß aus den Ausdrücken (4.97a) und (4.99b) folgen

$$\psi_{n-1}^{o(1)} = -\psi_o^{o(1)} + Q_n \psi_n^{o(1)}, \quad Q_n = (\psi_{n-1}^{o(1)} P_n)^{-1}$$

(4.102)

$$\psi_{n-1}^{o(2)} = -\psi_o^{o(2)} + Q_n' \psi_n^{o(2)}, \quad Q_n' = (\psi_{n-1}^{o(2)} P_n')^{-1}$$

Durch diese inverse Abbildungen lässt sich der Übergang $\psi_o^{o(1)} \rightleftarrows \psi_o^{o(2)}$ darstellen, und somit die Überführbarkeit von Zuständen in einander, wie sie für Konditionierbarkeit in dieser Arbeit gefordert wird.

4.4 Ebene Wellen und Elliptische Funktionen für biochemische Systeme

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse von §4.2 durch eine Hilfsbetrachtung untermauert; es werden auch dadurch zusätzliche Erkenntnisse über Charakteristiekn von Evolutionsprozessen gewonnen. (Eine ausführliche Behandlung der tiefen Verhältnisse zwischen Strukturen von elliptischen Funktionen, der Hilfsbetrachtung hier, und Evolutionsprozessen übersteigt die Rahmen dieser

Arbeit. Wir werden uns daher nur auf grobe Skizzen beschränken müssen.)

Ebene Wellen für partielle DGLen existieren, wenn die abgeleiteten gewöhnlichen DGLen periodische Lösungen bezüglich
besitzen, siehe z. B. Kopell + Howard [F-11]. Ohne in großen Details einsteigen zu wollen, wird hier der Frage kurz nachgegangen, was diese Voraussetzung in ursprünglichen Variablen $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}_t$, $\xi = \omega \cdot x - vt$ bedeutet; dies führt zu interessanten Ergebnissen, am wichtigsten

SATZ 4.28: Die Ebene Wellen eines Evolutionsprozesses sind durch elliptische Funktionen eindeutig bestimmt.

(Elliptische Funktionen sind meromorphe Funktionen mit zwei eindeutigen Perioden, deren Quotient nicht reel ist, siehe Courant + Horwitz [G-14], Parallelogramsatz der Periode)

Beweis: (Konstruktive Skizze) Ist $\psi(\xi)$ eine Ebene Welle, dann existiert mindestens ein $\xi^* \in \mathbb{R}$ so daß

$$\psi(\xi) = \psi(\xi + \xi^*) \tag{4.103}$$

(siehe Kopell + Howard [F-11]). Aber nach (4.11) gilt

$$\begin{aligned} \xi &= \overline{\varkappa}\cdot(\omega\cdot x - vt) - \eta \\ &= \overline{\varkappa}\left[\omega\cdot x - vt + ivt - ivt\right] - \eta \\ &= \overline{\varkappa}\left[\frac{\omega\cdot x + ivt)}{vt(1+i)} - 1\right] vt(1+i) - \eta \end{aligned} \tag{4.104}$$

Setze

$$\begin{aligned} z_1 &= \omega\cdot x + ivt \\ z_2 &= vt(1+i) \end{aligned} \qquad z_1, z_2 \in \mathbb{C} \tag{4.105}$$

Dann, aus (4.104) ergibt sich

$$\xi = \overline{\varkappa}\left[\left(\frac{z_1}{z_2} - 1\right) z_2\right] - \eta \tag{4.106}$$

Mit anderen Wörten

$$\xi : \mathbb{C} \times \mathbb{C} \longmapsto \mathbb{R} \tag{4.107}$$

Auf der komplexen Ebene $\mathbb{C} = \mathbb{R} \times i\mathbb{R}$ gilt: $\nu t(1+i)$ ist nur eine Translation der Gerade durch (o,o) und (1,i), und alle andere Punkte von (4.106) liegen oberhalb oder unterhalb dieser Gerade. Das heisst, auf verschiedenen Geraden auf $\mathbb{C}$. Die Periodizität bezüglich $\xi \in \mathbb{R}$ ergibt sich dann als die Periodizität bzgl $z_1 \in \mathbb{C}$. Daher hat $\psi(\xi) = \psi(z_1, z_2)$ bzgl $z_1 \in \mathbb{C}$ eine Menge von Perioden, die ein Modul Ω^* bilden; (ein Modul ist eine Zahlenmenge, deren Element uneingeschränkte Addition und Subtrktion unter einander zulassen).
Nach dem Periodenparallelogram, siehe Hurwitz + Courant [G-14] Seite 152 - 154 , gilt: Sind p , $p' \in \Omega^*$, dann existieren p'_1, p'_2 derart, daß

$$p = p' \bmod (p'_1, p'_2) \tag{4.108}$$

Anders ausgedruckt, bekommen wir

$$p = p' + m'_1 p'_1 + m'_2 p'_2 \quad , m'_1, m'_2 \in g \tag{4.109}$$

Diese Periodenformel wird aus

$$\begin{aligned} \xi^* &= m'_1 \xi'_1 + m'_2 \xi'_2 \\ \xi'_{\iota^*} &= \alpha_{1\iota^*}(\omega^* x^*) + \alpha_{2\iota^*}(i\nu^* t^*) \quad \iota^* = 1,2 \end{aligned} \tag{4.110}$$

ermittelt, wobei $(\omega^* \cdot x^*)$, $(\nu^* t^*)$ Perioden bzgl. der räumlichen bzw. zeitlichen Koordinaten sind. Durch Rückführung auf die ursprünglichen Koordinaten $(x_1, x_2, x_3, t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^t$ erhält man den Ausdruck in (4.109).

ANMERKUNG 4.29: Anstatt (4.104) kann auch der Ausdruck

$$\xi = \varkappa \left[(\omega \cdot x)(1+i) \left\{ 1 - \frac{\nu t + i(\omega \cdot x)}{(1+i)(\omega \cdot x)} \right\} \right] - \eta \tag{4.111}$$

benutzt werden. Die Bedeutung dieser beiden Möglichkeiten der Umformulierungen wird bald unten ersichtlich sein.

Wie aus dem Beweis vom Satz 4.28 hervorgeht, ist die Gerade durch die Punkte (o,o) und (1,i) eine Art kritische Hyperebene. Sie beinhaltet die Menge von $(\omega, \nu, x_1, x_2, x_3, t)$, für die SOWA-Wellen existieren; (stationäre Zustände unterscheiden sich von

allen anderen zulässigen Erscheinungsformen durch die SOWA-Wellen, siehe Kapitel 3). Daher kann der direkter Obergang zwischen den stationären Zuständen als die Abbildung dieser Hyperebene (durch (0,0) und (1,i)) in sich selber aufgefasst werden. Demgegenüber ist ein Entwicklungssystem (als Modell sequentiellen Übergänge, siehe Kapitel 3, und §4.2 oben) die Abbildung verschiedener Geraden auf diese eine Gerade durch (0,0) und (1,i), wie in Abb. 4.5 bildlich dargestellt wird:

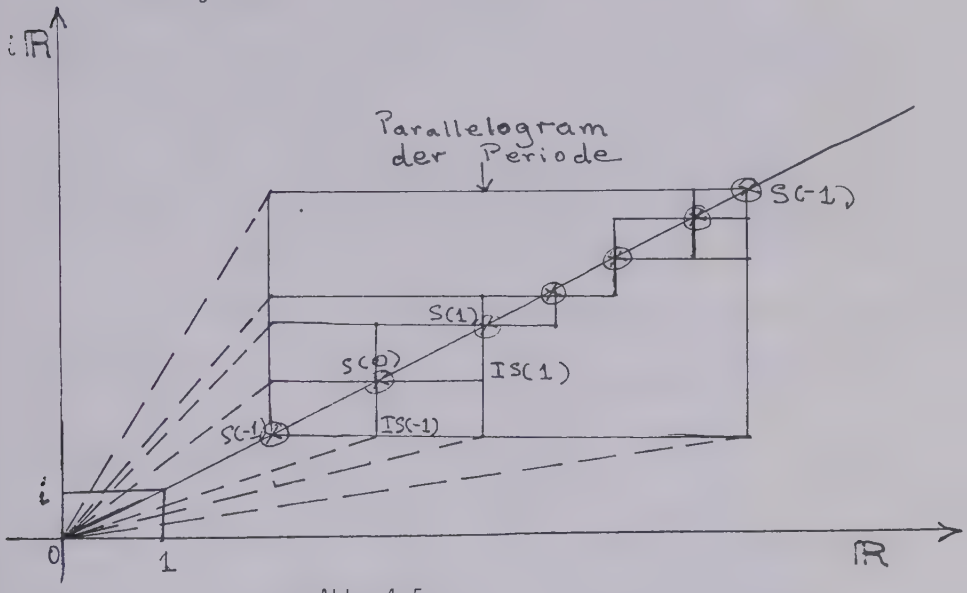


Abb. 4.5

Die obigen Überlegungen führen zu folgenden Feststellungen:

a) Evolution, insbesondere (bio-)chemische Evolution, entspricht der räumlichen Modulation (z.B. räumlichen Ausbreitung) der zeitlichen Charakteristika eines Prozesses, oder

b) sie entspricht der zeitlichen Modulationen räumlicher (Um-) Verteilungscharakteristika von Materie und/oder Energie.

Evolution, dargestellt als Entwicklungssystem, ist die Kombination von a) und b) oben. Allerdings geschieht dies durch sequentielles gegenseitiges Ablösen von a) und b) (Abb. 4.5), wie dies durch die Übergänge $S(-1) \rightleftarrows S(o) \rightleftarrows S(1)$ dargestellt wurde.

In allen Fällen sind die Evolutionsvorgänge von besonderen Interesse, die sich durch periodische Struturen auszeichnen, siehe Kapitel 3.

Übertragen auf die hier gestellte Aufgabe, und auf das Leitbild, die Nervenfaser, ergeben sich folgende Interpretationen: Im Seeligschen Modell, siehe Kapitel 1, in dem Materiezufluß erlaubt ist, trifft der Fall b) zu; auf der anderen Seite ist für die Nervenfaser eher der Fall a) zutreffend (da die Materieanhäufung in einer Nervenfaser als fast Konstant anzusehen ist). Für die Synthese von (bio-)chemischen Systemen, die die Eigenschaften der Nervenfaser annähernd aufweisen soll, ist der Fall für Entwicklungssysteme zu betrachten; es bedeutet einfach folgendes: Die Dichten einer Materieanhäufung und einer passenden phänomenologischen Effekts sind so lang zu verändern bis das gewünschte Flip-Flop-System entsteht. Dies ist das, was uner Konditionierung zu verstehen ist.

Die Identitäten in (4.109) und (4.110) haben folgende Bedeutung: Aus

$$\begin{aligned} \xi_1^* &= m_1' \xi_1' + m_2' \xi_2' \\ \xi_2^* &= m_1'' \xi_1' + m_2'' \xi_2' \end{aligned} \qquad m_1', m_2', m_1'', m_2'' \in \mathcal{G} \tag{4.112}$$

ergeben sich

$$(\xi_2^* - \xi_1^*) = (m_1'' - m_2'') \xi_1' + (m_2'' - m_2') \xi_2' \qquad \left.\begin{matrix} m_1'' - m_1' \\ m_2'' - m_2' \end{matrix}\right\} \in \mathcal{G} \tag{4.113}$$

Aus Abb. 4.2 folgt: Sind ξ_1^* und ξ_2^* charakteristische Perioden von zwei eindeutig verschiedenen stationären Zuständen, so müssen folgende Bedingungen stets gelten:

$$\begin{aligned} m_1'' - m_1' &\neq 0 \\ m_2'' - m_2' &\neq 0 \end{aligned} \tag{4.114}$$

Mit anderen Wörten:

LEMMA 4.30: Der Übergang von einem stationären Zustand zu einem anderen bedingt nichttrivialer Veränderungen der räumlichen und zeitlichen Charakteristika eines Prozesses.

Jeder stationäre Zustand hat daher räumliche und zeitliche charakteristische Komponente; ist der zeitliche Komponent unverändert, wie das 'Steady-State-Konzept erfordert, so bedeutet dies folgendes: Zu jedem festem $\nu \in \mathbb{R}$, gibt es eine Menge von Werten von ω für den betrachteten stationären Zustand. Ähnliches gilt bezüglich ν , wenn ω , anstatt ν , festgehalten wird. Von besonderem Interesse sind die Fälle, in denen diese Mengen nicht ein-Punkt-Menge sind.

Bezüglich der Hauptsätze in §4.2 (Satz 4.21 und Satz 4.22) gibt das Quotient

$$\text{(4.115)} \quad \frac{\xi_1^*}{\xi_2^*} = (m_1'\xi_1' + m_2'\xi_2')(m_1''\xi_1' + m_2''\xi_2')^{-1}$$
$$= (m_1'\xi_1' + m_2'\xi_2')\left(\sum \binom{-1}{s}(m_1''\xi_1')^s(m_2''\xi_2'')^{-1-s}\right)$$
$$\binom{-1}{s} = \frac{(-1)!}{(s!)(-1-s)!}$$

ausschlußreiche Betrachtungen: Aus $m_1'', m_2'', m_1', m_2' \in \mathcal{G}$ folgt unmittelbar

LEMMA 4.31: Folgende Notwendigkeiten führen zu folgenden Ergebnissen:

$$\text{(4.116)} \quad |\xi_1'|, |\xi_2'| \in Q \Rightarrow \xi_1^*(\xi_2^*)^{-1} \in Q$$
$$|\xi_1'|, |\xi_2'| \in \mathbb{R}\setminus Q \Rightarrow \xi_1^*(\xi_2^*)^{-1} \in \mathbb{R}\setminus Q$$

ANMERKUNG 4.32:

a) Eine Voraussetzung dafür, daß ξ_1' , ξ_2' deopellte Periode sind, ist die, daß $\xi_1'\xi_2'^{-1}$ nicht reell ist. Daher muß man in Lemma 4.35 nur die absolute Werte betrachten.
b) Die Frage ob (4.116) hinreichend ist, ist ein zahlen-theoretisches Problem, dem nicht in Rahmen dieser Arbeit nachgegangen werden kann.

Aus Lemma 4.31 folgt: Satz 4.21 gilt, wenn $|\xi_1''|, |\xi_2''| \in Q$ während für Satz 4.22 $|\xi_1'|\,|\xi_2'| \in \mathbb{R}\setminus Q$ erforderlich ist.

4.5: Das Sturm-Liouvillesche Problem für Entwicklungsmodelle

Weitere Eigenschaften von Modellgleichungen bzw Ungleichungen werden durch da. Zurückführen der abgeleiteten DGLen auf das Sturm-

Liouvillesche Problem gewonnen. Vor allem werden Bedingungen festgestellt, die numerische Betrachtungen weitgehend erleichtern.

Durch das Einsetzen von $Z = \psi(\xi)$, siehe Bezeichnungen und Symbole, $\xi = \omega \cdot x - \nu t$, gehen die Modellgleichungen (2.96) bis (2.98) bzw. (2.97) bis (2.99) in folgendes System gewöhnlicher DGLen über:

$$-\nu \frac{d\psi}{d\xi} + \nu^2 \tau_M'(\psi) \frac{d^2\psi}{d\xi^2} = D(\psi)(\omega\cdot\omega)\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\omega\cdot\omega)\frac{\partial D}{\partial \psi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 + \bar{\phi}(\cdots) + F(\psi,\mu) \tag{4.117}$$

Addiert man

$$0 = -\frac{1}{\varkappa}\nu^2 \frac{\partial D}{\partial \psi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 + \frac{1}{\varkappa}\nu^2 \frac{\partial D}{\partial \psi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 + \frac{1}{\varkappa}\nu^2\left(\frac{\partial \tau_M'}{\partial \psi}\left[\frac{d\psi}{d\xi}\right]^2 - \frac{\partial \tau_M'}{\partial \psi}\left[\frac{d\psi}{d\xi}\right]^2\right) \tag{4.118}$$

zu der rechten Seite der Gleichung (4.117), so ist Gleichung (4.117) darstellbar als

$$\frac{1}{\varkappa}\frac{d}{d\xi}\left(\tilde{\tilde{\chi}}(\psi)\frac{d\psi}{d\xi}\right) + \alpha_1 \psi = \hat{F}(\psi,\mu,\varkappa,\tau,D) \tag{4.119}$$

wobei

$$\tilde{\tilde{\chi}}(\psi) = \left[\nu^2 \tau(\psi) - (\omega\cdot\omega)D(\psi)\right]; \quad \alpha_1 = \alpha' \varkappa^{-1}$$

$$\hat{F}(\psi,\mu,\varkappa,\tau,D) = \frac{1}{\varkappa}\left[\nu\frac{d\psi}{d\xi} + \nu^2\frac{\partial \tau}{\partial \psi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 + \bar{\phi}(\cdots) + F(\psi,\mu) + \alpha'\psi\right] \tag{4.120}$$

ANMERKUNG 4.33: Die Ungleichungen von §§4.1 bis 4.3, die die Entwicklungssysteme aus Kapitel 3 charakterisieren, wurden durch die Bedingung $\partial\rho/\partial t > 0$ bzw $\partial\rho/\partial t < 0$ aus den ursprünglichen Modellgleichungen abgeleitet, d.h die Gleichungssysteme (2.75) bis (2.78). Für diese Fälle werden die entsprechenden Ungleichheitszeichen in den Ausdruck (4.117) eingesetzt, und in $\hat{F}(\psi,\cdots)$ in den Ausdrucken in (4.120) entfällt das Glied $d\psi/d\xi$.
Die Benutzung von den Systemen (2.75) bis (2.78) in Dreiergruppen (2.75) bis (2.77) bzw (2.76) bis (2.78) geht auf das Parallel-Verarbeitungsmodell (Abb. 2.11) zurück.

Der Ausdruck (4.119) ist mit dem Sturm-Liouvilles hem System ver-

gleichbar, siehe Ince [F-10] , und auch den Anhang §A2:

$$\frac{d}{dx}\left(K(x)\frac{dy}{dx}\right) - G(x)y = R\left(y, \frac{dy}{dx}\right) \qquad \beta_1 \leq x \leq \beta_2 \tag{4.121}$$

ψ ist eine Ebenewelle (die gesuchte Lösungsformen in dieser Arbeit), wen es in $\{$ periodisch (d.h. oszillatorisch) ist, siehe Kopell + Howard [F-11] . Nach der Sturm-Liouvilleschen Thoerie besitzt das System (4.121), mit $R(y, dy/dx) = 0$ eine oszillatorische Lösung, falls

$$-\frac{\delta^*}{\rho^*} > \frac{\pi^2}{(\beta_1-\beta_2)^2}, \quad \delta^* < 0$$
$$-\frac{\delta^{**}}{\rho^{**}} > \frac{\pi^2}{(\beta_1-\beta_2)^2}, \quad \delta^{**} < 0 \tag{4.122}$$

wobei

$$\delta^* = \inf G(x), \quad \rho^* = \inf K(x)$$
$$\delta^{**} = \sup G(x), \quad \rho^{**} = \sup K(x) \tag{4.123}$$

Im allgemeinem besitzt das System (4.121) mit $R(y, \frac{dy}{dx}) = 0$ keine oszillatorische Lösung, falls

$$G(x) \geq 0 \tag{4.124}$$

(siehe Coddington + Levinson [F-4] , und Ince [F-10])

Wendet man diese Sturmsche-Liouvillsche Theorie auf das System (4.119) unter der vorläufigen Annahme von $\hat{F}(\psi, \ldots) = 0$, dann ergeben sich folgende Konsequenzen:

a) $\alpha_1 \equiv 0$ führt zu dem Ergebniss, daß das System (4.119) keine Ebenewellen besitzt; dies liefert ein wichtiges Ergebnis:

LEMMA 4.34: Eine Menge chemischer Spezies (Elemente, Komponenten) die aufeinander einwirken, wird vorausgesetzt. Ferner wird angenommen, daß sich die Evolution dieser Spezies als Folge der wechseitigen Interaktionen mittels Ebenewellen vollzieht. Ausserdem ist die räumliche-zeitliche Beschreibung dieser Evolution vom selben Typ als die Modellgleichungen (2.75) bis (2.78), deren abgeleitete Form dem System (4.119) entspricht. Dann enthalten die nichtlinearen Funktionen der wechsel-

seitigen Interaktionen unter den Spezies stets nicht triaviale lineare Glieder bezüglich der beteiligten Spezies.

b) $\alpha_1 \neq 0$:

(i) Da $\overline{\varkappa} > 0$, sind

(4.125) $\boxed{\alpha_1 < 0}$ & $\boxed{\rho^* > 0}$

wegen (4.122a) die Bedingungen dafür, daß Ψ eine Ebenewelle darstellt.

(ii) Für den Ausdruck in (4.122b) geleten dagegen

(4.126) $\boxed{\alpha_1 < 0}$ & $\boxed{\rho^{**} > 0}$

Kehrt man die Ungleichungen (4.125) und (4.126) total um, d.h. gäbe es

(4.127) $\alpha_1 > 0$, $\tilde{\rho}^{**} < 0$, $\tilde{\rho}^{**} = -\rho^*$, $\tilde{\rho}^* < 0$, $\tilde{\rho}^* = -\rho^{**}$

so ist

(4.128) $$\left|\frac{\delta^*}{\rho^*}\right| \geq \left|\frac{\pi^2}{(\beta_2-\beta_1)^2}\right| \;\&\; \left|\frac{\delta^{**}}{\rho^{**}}\right| \geq \left|\frac{\pi^2}{(\beta_2-\beta_1)^2}\right|$$

stets erfüllt. Mit anderen Wörten: Ein Umkippen (spricht Flip-Flop) des Systems ist mit Hilfe von (4.127) durchaus möglich.
Bezogen auf das System (4.119) ergeben sich:

(4.129) a) $\rho^* = \inf \tilde{\tilde{\chi}}(\Psi)$, $\rho^{**} = \sup \tilde{\tilde{\chi}}(\Psi)$
$\forall \|\Psi\| < \overline{\delta}$, $0 < \overline{\delta} < +\infty$

b) Bestimme $\overline{\delta}$, $\alpha_1 = \delta^*$ und $\alpha_1 = \delta^{**}$

Da $\tilde{\tilde{\chi}}(\Psi) = \tilde{\tilde{\chi}}(\Psi, \tau, D, \overline{\varkappa}, \mu)$, wird $\tilde{\tilde{\chi}}(\Psi)$ als eine Funktion mehrerer Veränderlichen behandelt; es werden ihre Extrema mit Hilfe der üblichen Bedingungen bestimmt. Daraus ergeben sich algebraische Ungleichungen der Form

(4.130) $$\tilde{\tilde{P}}(\tilde{\tilde{\chi}}, \psi, \tau, D, \overline{\varkappa}, \mu) \geq 0 \quad \text{oder}$$
$$\tilde{\tilde{P}}(\tilde{\tilde{\chi}}, \psi, \tau, D, \overline{\varkappa}, \mu) \leq 0.$$

Mit einem stationären Zustand als Zentrum, werden dann alle Minima und Maxima in der Umgebung $\|\psi\| < \overline{\delta}$ bestimmt. Dann sind ρ^* und ρ^{**} das kleinste und das große Element der Menge der Minima bzw Maxima in dieser Umgebung. Dann mit Hilfe von den Ausdrucken in (4.122) werden die Parameterintervalle ermittelt, für die periodische Lösungen bzgl. ξ in Frage kommen. Hilfreich dabei ist auch folgender Oberlegung: Eine auf einem Interval (β_1, β_2) oszillatorische Funktionen hat mindestens einen Nullpunkt im Interval (β_1, β_2). Für oszillatorische Lösungen mit $\overline{m}$ Nullstellen im Interval (β_1, β_2) liefert die Sturm-Liouvillesche Theorie die Bedingung

(4.131) $$-\delta^*(\rho^*)^{-1} \geq \overline{m}^2 \pi^2 (\beta_1 - \beta_2)^{-2}$$
$$-\delta^{**}(\rho^{**})^{-1} \geq \overline{m}^2 \pi^2 (\beta_1 - \beta_2)^{-2}$$

(vgl. mit (4.122) für $\overline{m} = 1$).
Offenbar ist die Sturm-Liouvillsche Theorie hilfreich bei der Bestimmung der Anzahl von Perioden bzw. periodischen Lösungen.

Zum Abschluß dieses Kapitels wird noch das Ergebnis unterrtsichen, das in Lemma 4.34 zusammengefasst ist. Es zwegt, daß die linearen Glieder, wie im Seeligschen Modell, wesentlich für die Charakterisierung der periodischen Lösungen. Dementsprechend sind auch ihre Veränderungen wichtige Faktoren bezüglich der Frage nach eindeutig verschiedenen stationären Zustände als Voraussetzung für Konditionierbarkeit.

KAPITEL 5

Zur Numerik der Modellgleichungen und Entwurf von Simulationsmodellen

In diesem Kapitel werden die numerischen Aspekte der in dieser Arbeit aufgestellten Modellgleichungen betrachtet. Hierzu sind einige weitere vorbereitende Überlegungen erforderlich, u. a. die Einführung der expliziten Formen für die in §2.2.2 besprochenen veränderlichen Diffusions- und Relaxationskoeffizienten. Für diese numerische Betrachtungen dienen etwaige Simulierungsversuche als motivierende intergründe; dementsprechend wird auch ein Flußdiagram skizziert.

5.1 Die zu betrachtenden Gleichungen:

Die Gleichungen, deren Numerik hier betrachtet werden, sind schon an verschiedenen Stellen in Kapitel 2 bis 4 angetroffen worden. Für die Beschreibung der Konditionierbarkeit aus der Sicht der Numerik werden sie hier zusammengefasst in entsprechende Untermengen, und ggf durch andere ergänzt bzw. erweitert werden; diesem Abschnitt wird diese Aufgabe gewidmet.

5.1.1 DIE GRUNDGLEICHUNGEN:

Die Grundgleichungen für vollständige Simulierungsversuche von Evolutionsprozessen bestehen aus ähnlich strukturierten Gleichungen für die Energie- und Materiedichten, siehe Satz 2.43 in §2.3.3. Für die Materiedichte sind diese die Gleichungen von Typ (2.96) bis (2.99) (stets in Dreiergruppen der Abb. 2.11 entsprechend betrachtet); die Gleichungen für die verschiedene Hierarchiestufen der Energiedichte werden ähnlich konstriruiert, and sind nicht gesondert hier ausgeführt. Allerdings sollen, für den expliziten Einbau in Simulierungsversuche, auf die besonderen Abweichungen geachtet werden, die es zwischen den Strukturen der veränderlichen Diffusions- und Relaxationskoeffizienten, §2.2.2, für Energie- und Materiedichten gibt, siehe APTC-1 bis APTC-6 in §2.2.2.
Es soll daran errinert werden, daß die Gleichungen (2.96) bis (2.99) (2.99) die Erweiterung des Seeligschen Modells darstellen, die bereits in §2.3.3 eingehend behandelt wurden.

Die Grundgleichungen, und ihre besprochene Sonderformen in Kapitel 4, werden für numerische Betrachtungen folgendermassen zusammenge-

setzt:

a) Als erstes wird das Hopf-Malkinsche Problem gelöst; hierzu dient auch die in §4.5 besprochene Sturm-Liouvillesche Theorie als Hilfsmittel - die Bedingungen für periodische Lösungen bzw. Anzahl der Perioden.

b) Es folgen dann die Erneuerungsprobleme (§5.1.2 unten) als Erweiterung des Hopf-Malkinschen Problems. Die Lösungen der Erneuerungsprobleme bilden stets die Anfangswerte für Iterationen, die unten definiert werden werden. Während das Hopf-Malkinsche Problem für konstante Diffusions- und Relaxationskoeffizienten (siehe §2.2.2) gelöst wird, erfolgt hier bei den Erneuerungsproblemen die Einbeziehung kleiner Störungen in Formen von kleinen Schwankungen um nominale konstante Werte der Diffusions- und Relaxationskoeffizienten (an einem stationären Zustand). Dies erreicht man durch Reihenentwicklung (siehe z. B. (2.25) oben) in geeigneten kleinen Umgebungen von stationären Zuständen.

c) Die Grundgleichungen werden dann als Entwicklungsysteme betrachtet (Kapitel 3 und 4). Für einen Eigenwert aus der Lösung des Hopf-Malkischen Problem, und die entsprechende Lösung des Erneuerungsproblems, setzt man die veränderlichen Diffusions- und Relaxationskoeffizienten ein. Mit Hilfe der Iterationen in §5.3.3 unten werden dann andere stationäre Zustände angesteuert. Wichtige Konstante sind die Parameter in den expliziten Formen dieser Koeffizienten; sie bestimmen die Art der Veränderung der Koeffizienten, die für die erstrebten Übergänge notwendig sind.

Eine wesentliche Nebenbedingung für die Steuerung der numerischen Probleme ist die genauere Charakterisierung von $E-N$-Beziehungen (siehe Kapitel 2, §2.2.1). Dieses Problem muß stets für spezifische Aufgabe gesondert behandelt werden, da es darauf ankommt, welche phänomenologische Effekte betont werden; (eine Allgemeine Abhandlung übersteigt den Rahmen dieser Arbeit).
Zur Verdeutlichung der Bedeutung von E : In der Elektrochemie ist die Nernst-Plancksche Gleichung (siehe de Groote + Mazur [A-14], Offner [A-49]) die Beschreibung für den elektrischen Zustand einer vorhandenen Anzahl von chemischen, aufeinander einwirkenden Spezies (z.B. Ionen). Die in dieser Arbeit eingeführte skalare Funktion e (siehe §2.2.1) ist die Energiefunktionale, ver-

standen als die Hamiltonische Funktion dieses elektrischen Feldes. Für Probleme k-dimensionaler Leiter (mögliche Anwedungsbereiche für die Seeligsche Aufgabe) führt dies in die Festkörperchemie, siehe z.B. Göhr [N-7], Hamman [N-8], die nicht hier weiter erörtert werden kann. Neben der Betonung der elektrischen und magnetischen Effekten in der Festkörperchemie, sind es die Wärme- bzw. Temperatureinflüsse, die weitere Beachtung finden. Somit ist es stets erforderlich, die Kombinationen von Effekten zu präzisieren, die betont betrachtet werden, bevor die genauere Form von E bzw e bestimmt wird.

Ohne diese Nebenbedingung sind die Modellgleichungen dieser Arbeit Modelle mit freien Parametern ('Free Parameter Models'); sie können daher numerisch mit frei wählbaren E (Parametern) simuliert werden. Über inverse Fragestellungen kann dann auf die Hamiltonische Funktionale geschlossen werden, siehe §2.2.1.

5.1.2 DIE ERNEUERUNGSGLEICHUNGEN

Das Erneuerungsproblem eines Evolutionsprozesses bezieht sich auf die Frage nach der Aufrechterhaltung von Zuständen -

a) Bewahrung eines stationären Zustandes unter Einfluß von Störungen aus der Umgebung (des Prozesses), oder
b) Beibehaltung der Wege (Zwischenzustände) bei Übergängen von einem stationären Zustand zu einem anderen.

Mit anderen Wörten: Erneuerungsprobleme behandeln die Probleme der Zustände, die für bestimmte Verhalten eines Prozesses bzw Systems notwendig sind.

Für die Erhaltung von stationären Zuständen (für Prozesse ohne multiplikative Selbstreproduktion) ist, nach den üblichen Bedingungen für Extrema, folgende Poissonsche Ungleichung erforderlich, (siehe Mbaeyi [C-19]):

$$D(\rho)\nabla^2\rho + \tilde{\varphi}_1(\rho, \nabla\rho, f(\rho), \frac{\partial D}{\partial \rho}) \leq 0 \quad \text{in } \Omega$$

(5.1)

$$\tilde{\mu}_1 \frac{\partial \rho}{\partial n} + \tilde{\mu}_2 \rho = \tilde{g} \simeq \text{Const} \quad \text{auf } \partial\Omega$$

(Poissonsche Ungleichung ist die Erweiterung der Poissonschen

Gleichung, siehe Friedman [F-7], Petrovskii [N-13], durch die Hinzufügung des Ungleichheitszeichens).
Demgegenüber ist die Bedingung

$$D(\rho)\nabla^2\rho + \tilde{\varphi}_2(\rho, \nabla\rho, f(\rho), \frac{\partial\rho}{\partial\rho}) \geq 0 \text{ in } \Omega$$

(5.2)

$$\tilde{\tilde{\mu}}_1 \frac{\partial\rho}{\partial n} + \tilde{\tilde{\mu}}_2 \rho = \tilde{\tilde{g}} \neq \text{const} \quad \text{auf } \partial\Omega$$

erforderlich für die Nichterhaltung eines stationären Zustands

Ähnliche Ungleichungssysteme wie (5.1) und (5.2) ergeben sich für die Energiedichte e, und auch für die anderen Hierarchieelemente e_i, ρ_i, e_{ij}, ρ_{ij} in den Modellen dieser Arbeit. Die entsprechenden Randwertaufgaben wurden bereits in Kapitel 2, §2.3.3, durch die Ausdrücke (2.100) bis (2.113) eingeführt.

Zwar definiert die Ungleichungsystem (5.2) das Verlassen eines stationären Zustands, aber als Anfangswert (für die IGLen) von Entwicklungsystemen, siehe §5.3.3 unten, ist sie der Ausgangspunkt für andere Werte, darunter auch neue stationäre Zustände, für die dann die Bedingung (5.1) eintreten. Daher entspricht der Übergang von (5.2) auf (5.1) den Übergangsproblemen, die bereits in Kapitel 4 behandelt wurden; hier allerdings sind diese Übergangsprobleme durch Randwertaufgabe ergänzt.

Durch die Bedingung (5.1b) und (5.2b) ist es offenbar, daß die Menge der zulässigne Randwerte in zwei großen Untermengen zerfällt, nämlich die,die Definitionen 3.6 bis 3.10 (Kapitel 3) erfüllen; (definiert (5.2) die Aktivierung, so wird die Inhibition durch ähnliche Bedingung, aber mit umgekehrtem Ungleichheitszeichen bestimmt). Im Sinne der Übergänge $S(1) \rightleftarrows S(o) \rightleftarrows S(-1)$ (Kapitel 4, §§4.2.1, 4.2.2)) mit $S(1)$ und $S(-1)$ als die stabilen SS ergeben sich folgende Interpretationen:

a) Zur Erhaltung von $S(1)$ gilt das Ungleichungssystem (5.1).
b) Wird das Ungleichungssystem (5.2) aktiviert, so daß der Zustand $S(o)$ angesteuert wird, dann ist der Übergang $S(o) \longrightarrow S(-1)$, oder sogar die sofortige Rückkehr $S(o) \longrightarrow S(1)$, durch die Umkehrung der Ungleichheitsbedingung in (5.2) bestimmt, mit anschliessender Umwandlung in

(5.1) beim Erreichen eines neunen SS (S(-1) oder S(1))
Weitere Deutungen der Ungleichungssysteme (5.1) und (5.2) erfolgen in §5.3.1.

An Hand des Leitbilds (der Nervenfaser) soll sowohl die Beduetung dieser Bedingungen als auch die der veränderlicheen Diffusions- und Relxationskoeffizienten illustriert werden. Mit Hilfe der Entwicklungssysteme ist es nicht notwendig die Gleichungen der einzelnen Gebiete von NERU (siehe Kapitel 2) zu beschreiben. Durch die Zuordnungen

R_{-4}	R_{-3}	R_{-2}	R_{-1}	R_o	R_1	R_2	R_3	R_4
S(1)	S(o)	S(-1)	S(o)	S(1)	S(o)	S(-1)	S(o)	S(1)

gleicht die Fortpflanzung des Nervenimpulses den Obergängen zwischen SS. Dabei gelten die Ungleichungssysteme (5.1) und (5.2) abwechselnd von R_4 bis R_{-4} und das Pendeln der Diffusions- und Relaxationskoeffizienten zwischen bestimmten Minina und Maxima ermöglichen die Entstehung der entsprechenden Beschreibungen der Zustände in den Gebieten R_4 bis R_{-4}.

Durch Addition oder Subtraktion von Funktionen (wie bereits in Kapitel 3 und 4 benutzt worden war) lässt sich das Erneuerungsproblem allgemein als

$$D(\rho)\nabla^2\rho + \overline{\varphi}\left(\rho, \nabla\rho, f(\rho), \frac{\partial D}{\partial \rho}\right) + \tilde{W}(\rho) = 0 \text{ in } \Omega$$

$$\overline{\mu}_1 \frac{\partial \rho}{\partial n} + \overline{\mu}_2 \rho = \overline{g} \quad \text{auf } \partial\Omega \tag{5.3}$$

darstellen, wobei $\overline{W}(\rho)$ eine positive oder eine negative Funktion ist. Es bedeutet: Der Zustand, der bestimmte Verhalten erwarten lässt, wird als Folge von Umgebungseinflüssen (durch den Rand) und inneren Umverteilungen erzeugt.
Wie das Gleichungssystem (5.3) einheitlich mit anderen Gleichungssystemen behandelt wird, wird im nächsten Abschitt erörtert.

Die bisher erörteten Erneuerungsprobleme gelten Prozessen ohne multiplikative Selbstreproduktion. Aber der Photolawineneffekt,

siehe Abb. 2.36, der als mögliche Kandidat für eine auf Photochemie sich stützende chemische Informationsverarbeitung (Kapitel 2) erwähnt wurde, ist ein multiplikativer Prozess; für diesen Typ von Prozessen ist das Erneurungsproblem durch (nichtlineare) biharmonische Gleichungen - elliptische DGLen 4. Ordnung - gegeben, siehe Mbaeyi [C-19] , und für Einführung in die biharmonische Probleme, Morse und Feshbach [N-29] Seite 1786 . Jede biharmonische DGL lässt sich als (nichtlineare) Koppelung von zwei harmonischen DGLen (partiellen DGLen) darstellen, so daß sich die Formen in (5.1) und (5.2), bzw. (5.3), weiterhin als Grundformen anbieten. Also, es wird auf gesonderte Darstellung für diesen Fall verzichtet.

5.1.3 GEWÜNSCHTE LÖSUNGSFORMEN UND DIE ABGELEITETEN GLEICHUNGEN

Die gewünschte Lösungsform in dieser Arbeit ist die Ebene-Welle im allgemeinen, und speziell SOWA-Welle ('Solitary Wave'), siehe Kapitel 3. Dafür wird die Substitution

$$\mathcal{Z} = \psi(\xi) = \psi(\omega \cdot x - \nu t) \tag{5.4}$$

gemacht, wobei $\mathcal{Z}$ die vektorielle Zusammenfassung aller hierarchischen Elemente $(e, \rho) \longleftrightarrow (e_i, \rho_i) \longleftrightarrow (e_{ij}, \rho_{ij})$ darstellt (siehe Bezeichungen und Symbole); das heisst:

$$\mathcal{Z} = \tilde{\mathcal{E}} + \tilde{\rho} \quad (= \tilde{\psi}_1(\xi) + \tilde{\psi}_2(\xi))$$

$$\tilde{\mathcal{E}} = \begin{pmatrix} e \\ 0 \\ e_1 \\ 0 \\ \vdots \\ e_m \\ 0 \\ e_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ e_{mn_m} \end{pmatrix} = \tilde{\psi}_1(\xi) \; ; \quad \tilde{\rho} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \\ 0 \\ \rho_1 \\ 0 \\ \vdots \\ \rho_m \\ 0 \\ \rho_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \rho_{mn_m} \end{pmatrix} = \tilde{\psi}_2(\xi) \tag{5.5}$$

ANMERKUNG 5.1: Bei der Benutzung der Modellgleichungen (2.96) bis (2.99) in Dreiergruppen (dem Parallel-Verarbeitungsprogramm von Abb. 2.11 entsprechend), wird, unter Beachtung von (2.72) bis (2.7), $\tilde{\rho} \longleftrightarrow (\tilde{\rho}_1, \ldots, \tilde{\rho}_{\bar{m}}) \longleftrightarrow \{\tilde{\rho}_{i,j}\}$ für den äussersten rechten Kasten in Abb. 2.11 eingesetzt, aber $\rho \longleftrightarrow (\rho_1, \ldots, \rho_m) \longleftrightarrow \{\rho_{ij}\}$ $i = 1, \ldots m, j = 1, \ldots n_i$ für die übrigen parallel-verarbeitenden Kästen in derselben Abb. 2.11.

In Kapitel 2 und 4 wurde bereits festgestellt, daß das Einsetzen der der Substitution von Typ (5.4) in die Modellgleichungen zu DGLen 2. Ordnung führt, d.h zu DGLen der Form

$$
\begin{aligned}
-\nu\dot{\psi} + \nu^2\tau'_{in}\ddot{\psi} &= D(\psi)(\omega\cdot\omega)\ddot{\psi} \\
&+ (\omega\cdot\omega)\frac{\partial D}{\partial\psi}(\dot{\psi})^2 + \bar{\bar{\Phi}}(\cdots) + F(\psi,\mu)
\end{aligned}
\tag{5.6}
$$

wobei die Wellenphase $\xi = \omega\cdot x - \nu t$ die neue Variable ist. Umbeschrieben als ein System von DGLen 1. Ordnung ergibt sich folgendes System:

$$
\begin{aligned}
\dot{\psi}^\circ &= A^\circ\psi^\circ + F^\circ(\psi,\mu,\nu,\omega,D(\psi),\bar{\bar{\Phi}}\cdot) \\
\psi &= \psi_1^\circ \qquad \psi^\circ = \begin{pmatrix}\psi_1^\circ\\ \psi_2^\circ\end{pmatrix};\ F^\circ = \begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ \neq 0\end{pmatrix}\ A^\circ = \begin{pmatrix}0 & \neq 0\\ \neq 0 & \end{pmatrix} \\
\dot{\psi}_1^\circ &= \psi_2^\circ \\
A^\circ &\equiv 2N\times 2N \text{ Matrix},\ \psi_1^\circ, \psi_2^\circ \in \mathbb{R}^N
\end{aligned}
\tag{5.7}
$$

Die Matrix A° ist notwendigerweise (für die Erfüllung der Flip-Flop-Eigenschaft) singulär, wie bereits in den vergangenen Kapitel mehrfach festgestellt wurde. Für numerische Fragen empfehlt sich daher eine Störungsrechung, wodurch A° regularisiert wird. Hierzu wird die Eigenwertzerlegung (4.44) bis (4.47) herangezogen. Für alle Vektorkomponente, die der Bedingung (4.44) genügen, wird die Transformation

$$
\tilde{\psi}^\circ_{K_1} = \tilde{\psi}^\circ_{K_1}(\xi) = \left[1 - \exp(-|\epsilon|\xi)\right]\psi^\circ_{K_1}, \qquad K_1 = 1,\dots n^* \geq 1
\tag{5.8}
$$

vorausgesetzt, und für die restlichen Komponenten gilt die Identitätssbbildung. Das heißt: Man betrachte die Transformation $\mathbb{R}^{2N}\to\mathbb{R}^{2\tilde{N}}$

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}^\circ(\xi) &= \tilde{T}\psi^\circ \\
\tilde{T} &= \begin{pmatrix} -\epsilon & & & & \\ & \ddots & & 0 & \\ & & -\epsilon & & \\ & & & 1 & \\ & 0 & & & \ddots \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}\Bigg\}n^* \text{ Komponente}
\end{aligned}
\tag{5.9}
$$

Die Eigenwertzerlegung (4.44) bis (4.47) geht dann in die Störungsform

$$\text{a)}\ \lambda_{i m_1'}(\tau,\eta,\sigma,D,\mu,\epsilon) \neq 0 \qquad m_1' = 1,\dots,N' \geq 0$$

$$\text{b)}\ \operatorname{Im}\lambda_{i m_2'}(\tau,\eta,\sigma,D,\mu,\epsilon) \neq 0,\ \operatorname{Re}\lambda_{i m_2'}(\tau,\dots,\epsilon) \leq 0$$

$$m_2' = 1,\dots,N'',\ \boxed{N'' \geq 1}$$

(5.10) $$\text{c)}\ \left|\operatorname{Im}\lambda_{i m_3'}(\tau,\dots,\epsilon)\right| \geq 0,\ \operatorname{Re}\lambda_{i m_3'}(\tau,\dots,\epsilon) > 0$$

$$m_3' = 1,\dots,N''',\ \boxed{N''' \geq 0}$$

$$\text{d)}\ \operatorname{Re}\lambda_{i m_4'}(\tau,\dots,\epsilon) \neq 0,\ \operatorname{Im}\lambda_{i m_4'}(\tau,\dots,\epsilon) \neq 0$$

$$m_4' = 1,\dots,N^{IV},\ \boxed{N^{IV} \geq 0} \qquad N''' + N^{IV} > 0$$

$$N''' + N^{IV} = N_1 - (N' + 2N'') \text{ bzw } 2(N''' + N^{IV}) = N_1 - (N' + 2N'')$$

über, mit der anschliessender Forderung, daß für $|\epsilon| \longrightarrow 0$ die Zerlegung (4.44) bis (4.47) als Grenzwert erhalten wird. Das System (5.7) geht dann in das System

$$\dot{\tilde{\psi}}^{\circ}(\epsilon) = A^{\circ}(\epsilon)\,\tilde{\psi}^{\circ} + F^{\circ}(\psi,\mu,\dots,\overline{\varphi},\epsilon) \tag{5.11}$$

über (für das Hopf-Malkinsche Problem), dessen Lösung die IGL

$$\tilde{\psi}^{\circ}(\epsilon) = \exp\left[A^{\circ}(\epsilon)(\xi-\xi_0)\right]\tilde{\psi}^{\circ} + \int_{\xi_0}^{\xi}\left\{\exp\left[A^{\circ}(\epsilon)(\xi-\xi')\right]F^{\circ}(\psi,\dots,\epsilon)\,d\xi'\right. \tag{5.12}$$

darstellt.

Für Erneuerungssysteme: Durch das Einsetzen der Substitution (5.4) in Gleichungen von Typ (5.3) für alle Hierarchieelemente $(e,\rho),(e_{ij},\rho_i),(e_{ijs},\rho_{ijs})$ ergibt sich DGLen 2. Ordnung von Typ (5.6). Das heisst: Die abgeleiteten Gleichungen für das Erneuerungsproblem ist durch das System

$$\nu^2\tau_{M}^{*\prime}\ddot{\psi} = d^{*}(\omega\cdot\omega)\,\dot{\psi} + \overline{\varphi}(\dots) + F(\psi,\mu^{*}) \tag{5.13}$$

mit der Randwertaufgabe

(5.14) $$\alpha_1 \omega \cdot \frac{d\psi}{d\xi} + \alpha_2 \psi = \vartheta \simeq \text{const}$$

Das System wird in die Sturm-Liouvillesche Form überführt, also in die Form

(5.15) $$\frac{d}{d\xi}\left(\mathring{\chi}(\psi)\frac{d\psi}{d\xi}\right) = \mathring{\alpha}_1 \psi = \mathring{F}(\psi, \mu, \nu, \omega \ldots)$$

wobei

$$\mathring{\chi}(\psi) \simeq \left[\nu^2 \bar{\tau}^{\circ\prime}_{M} - (\omega\cdot\omega)d^{\circ}\right], \quad \mathring{\alpha}_1 = \alpha' \bar{\varkappa}^{-1}$$

(5.16) $$\mathring{F}(\psi, \mu, \nu, \omega, \ldots) = \frac{1}{\bar{\varkappa}}\left[\nu^2 \frac{\partial \bar{\tau}}{\partial \psi}\left(\frac{d\psi}{d\xi}\right)^2 + \bar{\phi}(\ldots) + F(\psi, \mu^{\circ}) + \alpha' \bar{\psi}\right]$$

(vgl. (4.119) und (4.120)).

ANMERKUNG 5.2: Die Benutzung von Substitutionen von Typ (5.4) in Gleichungen von Typ (5.3) wurde eingehend in §2.2.5 erörtert und begründet.

Die Lösung des System (5.15) mit der RWA (5.14) ist durch folgende Volterrasche IGL

(5.17) $$\psi = \tilde{\tilde{f}} + \bar{\lambda} K\psi$$
$$K\psi = \int_{\xi_0}^{\xi} G(\xi, \xi')\hat{F}(\psi(\xi', \ldots))\, d\xi'$$
$$\tilde{\tilde{f}} = \vartheta \psi', \quad \bar{\lambda} = \bar{\lambda}(\bar{\varkappa}, \mu)$$

gegeben, siehe Chambers [G-4], Ince [F-10]; dabei ist $G(\xi, \xi')$ die entsprechende Greensche Funktion, und ψ' ist die Lösung des Systems (5.15) mit $\hat{F} \equiv 0$ (d.h. die Lösung der homogenen Sturm-Liouvilleschen Gleichung).

Ein geeigneter Anfangswert (AW) ist eine Lösung von (5.17) unter folgender Einschränkung:

(5.18) $$|\vartheta| \simeq 0$$

Das heisst, nach Definition 3.6, RWA, für die die Bedingungen (2.105), (2.106) und (5.1) zutreffen - also ein stationäre Zustand. Auf dieser Weise werden die HOpf-Malkinschen und die Erneuerungsprobleme eng verknüpft.

Für Entwicklungssysteme bekommt man auch Volterrasche IGL von Typ (5.17). Ihre Herleitung wird allerdings erst deutlicher nach Abschluß de Ausführungen über Konditionierungswege (§5.3.1); dort wird sie als Abschluß der Herleitungen in diesem Abschnitt eingeführt. Bis dahin folgen weitere Hilfsbetrachtungen für nermische Verknüpfung von Erneurungs- und Entwicklungssystemen, und somit Konditionierbarkeit durch numerische Iteration definieren.

5.1.4 ALTERNATIVER WEG ZUR PERIODISCHEN LÖSUNG GEWÖHNLICHER DIFFERENTIALGLEICHUNGEN

Die Exponentialfunktion $\exp[A(\epsilon,\bar{\mu})\,\{\,]$ spielt eine wichtige Rolle in der IGL für das Hopf-Malkinsche Problem, siehe (5.12) oben; sie hat die explizite Darstellung

$$\exp[A(\epsilon,\mu)\{\,] = \sum_{j''=1}^{4N} \exp\lambda_{j''}(\epsilon,\bar{\mu})\, L_{j''}(A^{*}) \tag{5.19}$$

$$L_{j''}(A^{*}) = \prod_{\substack{j''=1 \\ j''_1 \neq j''}}^{4N} \frac{(A - \lambda_{j''}\underline{I})}{(\lambda_{j''} - \lambda_{j''_1})} \tag{5.20}$$

siehe Apostol [G-1]; $\lambda_{j''}(\epsilon,\bar{\mu})$ sind Eigenwerte mit der Zusammensetzung in (5.10).

Die Suche nach SOWA-Wellen (speziellen Ebenewellen) hat folgende Forderung zur Folge: Es werden die in $\{$ periodischen Lösungen gesucht, siehe die Ausdrücke (3.19) bis (3.22) in Kapitel 3 §3.2. Hierzu ist die Bedingung für eine minimale Periode ω_0 die:

$$\omega_0 = \omega_1 \Theta_1 = \cdots = \omega_{4N}\Theta_{4N} \tag{5.21}$$

$$\Theta_{j''} \in \mathcal{J} \qquad \Theta_{j''} > 0$$

siehe Urabe [G-25] bis [G-27], uns auch Satz 4.21 in Kapitel 4. Diese Bedingung ergibt sich aus der Tatsache, daß die Abbildung

$$\varphi : (\omega_{j''})(\omega_{j_1''})^{-1} \longmapsto \mathbb{R} \qquad j_1'' \neq j'' \qquad j_1'', j'' = 1,2,\dots,4N \tag{5.22}$$

mit

$$\varphi = \begin{cases} 1 & \omega_{j''} \in Q \\ 0 & \omega_{j''} \in \mathbb{R} \setminus Q \end{cases} \tag{5.23}$$

eine überall auf $\mathbb{R}$ unstetige Funktion darstellt, siehe Simmons [F-23].
Durch die Definiton von irrationalen Zahlen, ist es offenbar, daß die Bedingung

$$\left(\frac{\omega_{j''}}{\omega_{j_1''}}\right) \in \mathbb{R} \setminus Q \tag{5.24}$$

zu keiner minimalen Perioden führen; sie definiert die Voraussetzung für die Existenz von eindeutig verschiedenen periodischen Lösungen, wie sie in Satz 4.22 (Kapitel 4) angegeben wurde.

Zur Bestimmung periodischer Lösungen (für das Hopf-Malkinsche Problem) wird ein Weg beschritten, der wesentliche Abweichungen von gewöhnlichen Methoden darstellt. Infolge der vielen inneren Parameter, die eine Vielzahl von Bifurkationen verursachen können, ist es numerisch schwerig, ohne Kenntnis einer verbindlichen Parametergleichung (algebraische Fläche der polynomischen Beziehungen unter den Parametern) nach folgender herkommlichen Art voranzugehen - die Untersuchung der Identität, die sich aus der Forderung

$$\psi(\xi) \simeq \psi(\xi + \xi^*) \tag{5.25}$$

$|\xi^*| < \infty$ eine Periode) für periodische Lösungen ergeben, siehe Malkin [F-16], Mitropolski [F-21]; das heisst, die Untersuchung von

$$\exp\left[A^0(\epsilon)(\xi - \xi_0)\right]\psi^0 - \exp\left[A^0(\xi)(\xi + \xi^* - \xi^0)\right]\psi^0$$
$$\simeq \int_{\xi_0}^{\xi+\xi^*} \left\{\exp\left[A^0(\epsilon)(\xi + \xi^* - \xi')\right]F^0 d\xi' - \int_{\xi_0}^{\xi} \exp\left[A^0(\epsilon)(\xi - \xi')\right]F^0 d\xi \right. \tag{5.26}$$

Dieser Weg ist numerisch schwerig, denn die Periode sind selbst von den Parametern ϵ, μ u.s.w abhängig, so daß die Integrationsgrenzen sehr unbestimmt sind.

Diese Schwerigkeiten werden folgendermassen umgegangen:

a) Die Lösung

$$\overline{\Psi}(\xi) = \exp\{[A(\epsilon,\bar{\mu})]\xi\}\,\overline{\Psi}^{\circ} \tag{5.27}$$

des linearen Teils des Systems (5.11) wird mit Hilfe der Formel (5.19) und (5.20) ermittelt

b) Beim Vorhandensein von Komplexen Eigenwerten (Voraussetzung periodischen Lösungen, siehe (5.10) oben) ist $\exp[A(\epsilon,\bar{\mu})]\xi$ durch die reelle Teile bestimmt, während das Nullsetzen von den imaginären Teilen parameterische Beziehungen liefert.

c) Die Darstellung (5.27) wird durch Reihenentwicklung in Tchebycheffschen Polynomen (in der Variable ξ) approximiert; sei

$$\overline{\Psi}(\xi) = \sum_{q=0}^{\infty} \alpha_q T_q(\xi) \tag{5.28}$$

diese Approximation, so gilt nach (5.25) die Identität

$$\sum_{q=0}^{\infty} \alpha_q T_q(\xi+\xi^*) = \sum_{q=0}^{\infty} \alpha_q T_q(\xi) \tag{5.29}$$

Die Tchebycheffschen Polynome $T_q(\xi)$ haben die allgemeine Darstellung

$$\begin{aligned} T_0(\xi) &= 1 \\ T_1(\xi) &= \xi \\ T_{q+1}(\xi) &= 2\xi T_q(\xi) - T_{q-2}(\xi) \end{aligned} \tag{5.30}$$

Neben den orthogonalen und Extremaleigenschaften, siehe Rivlin [G-23], besitzen die Tchebycheffscen Polynome auch folgende wichtige Eigenschaften, die bei numerischer Approximation gewöhnlicher DGLen angenehme rekurssiven Beziehungen

erzeugen:

(5.31) $$T_q(\xi)T_{q'}(\xi) = \frac{1}{2}T_{q+q'}(\xi) + T_{(q-q')}(\xi)$$

(5.32) $$\int T_q(\xi) = \frac{1}{2}\left\{\frac{T_{q+1}(\xi)}{q+1} - \frac{T_{q-1}(\xi)}{q-1}\right\}$$

(5.33) $$\{T_{q+1}(\xi) - 1\}\{T_{q'-1}(\xi) - 1\} = \{T_q(\xi) - T_{q'}(\xi)\}^{i}$$

(5.34) $$\frac{d}{d\xi}\left(T_q(\xi)\right) = \sum_{i'=1}^{q} \frac{T_q(\xi)}{\xi - \bar{\xi}_{i'}} \quad (\bar{\xi}_{i'} \equiv \text{Nullstellen})$$

Durch Anwedung dieser Eigenschaften geht folgendes aus der Identität (5.29) hervor: Es existieren Polynome $P_j(\xi^*, \xi)$ j-ten Grades in ξ^* mit ξ al Koeffizienten, und der Eigenschaft

(5.35) $$P_j(\xi^*, \xi) = 0 \qquad j = 1, \ldots, \tilde{n}, \quad \tilde{n} \to +\infty$$

Die Aufgabe für periodische Lösung lautet nun: Man bestimme alle Wurzeln der Polynome (5.35), z.B durch Anwendung das Newtonsche Iterationsverfahren, siehe Nobel [G-20].
Ein unmittelbares Nebenergebnis ist: Für die Anzahl a^+ der vorhandenen Periode gilt

(5.36) $$a^+ \leq \sum_{j=1}^{\tilde{n}} j$$

So, neben der Bestimmung der vorhandenen Perioden, ermöglicht dieses Verfahren eine Abschätzung der oberen Grenzen der Anzahl der möglichen periodischen Lösungen.

d) Für die gewünschte Lösungsformen, werden die Lösungen herausgesucht, die der Bedingung für SOWA-Wellen genügen, siehe §3.2; hierzu ist es erforderlich, die Parameter ξ auf die urprünglichen Variablen $(\omega \cdot x - \nu t)$ zurückzuführen, siehe §5.1.5, das unmittelbar folgt.

Es ist offenbar, daß diese mehrschrittige Verfahren den Vorteil haben, komplete Information über die Zusammenhänge zwischen den inneren Parametern und der Existenz von SOWA-Wellen zu liefern.

5.1.5 ZUR ABBILDUNG VON $(\omega \cdot x - vt)$ AUF $[0,1]$

Die Integration aller abgeleiteten Gleichungen erfolgt über das Interval $[0, 1]$ aus folgendem Grund: Wegen der eingeführten hierarchischen Gliederung der Dichtefunktionen, ist auch das Gebiet $\bar{\Omega} \equiv \Omega \cup \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$ hierarchisch gegliedert, siehe Seite 44 dieser Arbeit. Infolgedessen gibt es verschiedene $\xi = (\omega \cdot x - vt)$ für die verschiedenen Hierarchieelementen, so daß gemeinsame Integrationsgrenze notwendig wird. Dies wird durch die Abbildung auf $[0, 1]$ erreicht; hierzu ist

ANNAHME 5.3: $\|\bar{\Omega}\| < +\infty$

erforderlich. (Für andere Probleme, wo es notwendig ist, $x, t \longrightarrow +\infty$ zu betrachten, benutzt man an der Stelle von Annahme 5.3 eine geeignete Kompaktifizierung des Raumes $\mathbb{R}^d$).

Es wird die skalare Funktion

$$\bar{R}^2 = \omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_2^2 + v^2 t^2 \tag{5.37}$$

gebildet. Es lässt sich leicht nachprüfen, daß

$$(\omega \cdot x - vt)^2 - 2\left[vt(\omega \cdot x) + \Delta^*\right] = \bar{R}^2 \geq 0$$

$$\Delta^* = \sum_{k', k''=1'}^{3} (\omega_{k'} x_{k'})(\omega_{k''} x_{k''}) \quad , \quad k' \neq k'' \tag{5.38}$$

gilt. Durch das Einsetzen von

$$0 < \gamma = \frac{vt(\omega \cdot x) + \Delta^*}{(\omega \cdot x - vt)^2} \leq \frac{1}{2} \tag{5.39}$$

ergibt sich folgende Abschätzung

$$\bar{R} \leq (\omega \cdot x - vt)\left[1 - \frac{\gamma(2-\gamma)}{2(1-\gamma)}\right] \tag{5.40}$$

Mit anderen Wörten: Es gelten

$$\bar{R} \simeq \alpha' \xi' \,, \quad \bar{R} \in [0, \infty) \triangleq \mathbb{R}^+$$

(5.41)

$$\alpha' = [1 - \gamma(2-\gamma)2^{-1}(1-\gamma)^{-1}]$$

$$0 < \alpha' < 1$$

Schließlich wird $\bar{\mathbb{R}}^+ = \mathbb{R}^+ \cup (\infty)$ auf $[0, 1]$ abgebildet und ermöglicht die Darstellung (4.11), Kapitel 4.

Für die Benutzung der Tchebycheffsche Polynome (§5.1.4) sind es die Lanczos-Transformierten, die es zu betrachten gilt, siehe Fox und Parker [G-9]; dafür ist die leicht zu definierende Abbildung $[-1 \,, 1] \longrightarrow [0 \,, 1]$ erforderlich.

ANMERKUNG 5.4: Gewöhnlich wird die skalare Funktion

$$\tilde{R}^2 = \omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2 - v^2 t^2$$

(5.42)

$$= (\omega \cdot x - vt)(\omega \cdot x + vt) - 2 \sum_{K', K''} (\omega_{k'} x_{k'} \omega_{k''} x_{k''}) vt$$

(Lorenz-Transformation, siehe Petrovskii [N-13]) betrachtet. Durch folgende Überlegungen

$$a) \; (\omega \cdot x - vt)^2 + (\omega \cdot x + vt)^2 = 2[(\omega \cdot x)^2 + v^2 t^2]$$

$$= 2[\bar{R}^2 - 2 \sum \omega_{k'} x_{k'} \omega_{k''} x_{k''}]$$

(5.43)

$$b) \; 0 \le [(\omega \cdot x - vt) - (\omega \cdot x + vt)]^2 = 2[\bar{R}^2 - 2 \sum \omega_{k'} x_{k'} \omega_{k''} x_{k''}] - 2\tilde{R}^2 - 4 \sum (\omega_{k'} x_{k'} \omega_{k''} x_{k''}) vt$$

lässt es sich leicht durch Abschätzungen nachweisen, daß

$$\tilde{R}^2 \le \bar{R}^2 [1 - (2 \sum \omega_{k'} x_{k'} \omega_{k''} x_{k''}) \bar{R}^2]$$

(5.44)

$$\tilde{R} \longrightarrow \bar{R} \,, \quad \|x\| \longrightarrow +\infty$$

Das heisst: Bei größeren Entfernungen unterscheiden sich die zwei Wellenformen $\psi(\omega \cdot x - vt)$ und $\psi(\omega \cdot x + vt)$ unwesentlich; (die 2. Wellenform spielt allerdings keine Rolle in chemischen Evolutionsfragen).
Die skalare Funktion in (5.37) ist daher ein zulässiges Dual für die übliche klassische Betrachtungen in der Theorie der partiellen DGLen.

5.2 Andere Hilfsbetrachtungen

In diesem Abschnitt wollen wir weitere Hilfsmittel für die numerischen Betrachtungen bereitstellen. Vor allem werden explizite Formen der veränderlichen Diffusions- und Relaxationskoeffizienten angeben, und auch die für die Reizimpulse, die in Kapitel 3 diskutiert wurde. Hinzu kommen kleinere Ergänzungen an Modellgleichungen, durch Präzisierung der für die Konditionierung notwendige Steuerungsprobleme und die Einführung von erweiterten nichtlinearen Gliedern.

5.2.1 DIE STEUERUNGSPROBLEME DER ERSTREBTEN KONDITIONIERUNG:

Die Modelle für Simulierungsversuche werden in der Form von Input-Output Modelle erfasst. Dadurch können die Übergänge zwischen den Steady States als Steuerungsprobleme definiert. Es ist daher notwendig, Ausgangs- und Zielpunkte genauer zu definieren; hierzu wird der Vektor $\tilde{Z}^{\circ}(\epsilon)$ benutzt.
Da die erstrebte Konditionierung durch die Übergänge $S(1) \rightleftarrows S(o) \rightleftarrows S(-1)$ definiert sind, und die ersten partiellen Ableitungen (bzgl. $t \in \mathbb{R}_t$) der Dichtefunktionen an diesen Stellen identisch verschwinden, bedeutet dies, daß an den Stellen

$$\tilde{Z}_1^{\circ}(\epsilon) \neq 0 \,, \quad \tilde{Z}_2^{\circ}(\epsilon) \simeq 0 \tag{5.45}$$

Die erstrebte Übergänge mit den Zwischenstufen IS(1), IS(-1), siehe Kapitel 4 und §5.3.1 unten, führen denn zu folgenden Steuerungsproblemen:

$$\begin{array}{ccccc}
\left(\tilde{Z}_1^{\circ *} \neq 0,\ \tilde{Z}_2^{\circ *} \simeq 0\right) & \longrightarrow & \left(\tilde{Z}_1^{\circ} \neq 0,\ \tilde{Z}_2^{\circ} \neq 0\right) & & \\
S(1) & & & \searrow & \\
 & & & S(o) & \left(\tilde{Z}_1^{\circ **} \neq 0,\ \tilde{Z}_2^{\circ} \simeq 0\right) \\
S(-1) & & & \swarrow & \\
\left(\tilde{Z}_1^{\circ ***} \neq 0,\ \tilde{Z}_2^{\circ} \simeq 0\right) & \longleftarrow & \left(\tilde{Z}_1^{\circ} \neq 0,\ \tilde{Z}_2^{\circ} \neq 0\right) & & IS(-1)
\end{array} \tag{5.46}$$

($\tilde{Z}_1^{\circ *}$, $\tilde{Z}_1^{\circ **}$, und $\tilde{Z}_1^{\circ ***}$ sind Werte von $\tilde{Z}_1^{\circ}$ an entsprechenden SS). Durch das Hopf-Malkicshe Problem sind die Zustände S(1), S(o) und S(-1) bestimmt; ihre Stabilität bzw Instabilität werden durch die Erneuerungsprobleme definiert. Das Konzept der Entwicklungssysteme besorgt die restliche fehlende Verbindungen für (5.46) oben.

ANMERKUNG 5.5: $\tilde{\tilde{Z}}^* \simeq \bigcirc$ usw ist hauptsächlich makroskopisch zu deuten; mikroskopisch, siehe §4.2, kann dies durchaus von gemischten Zuständen (der niedrigeren Hierarchieebenen) getragen werden. Aber stets ausschlagebend ist das makroskopische Bild, als eine Art 'Summe' der miteinander interagierenden Komponenten.

5.2.2 EXPLIZITE FORMEN FÜR DIFFUSIONS- UND RELAXATIONSKOEFFIZIENTEN

Für die Herleitung der Formen der veränderlichen Diffusions- und Relaxationskoeffizienten und der Impulfunktionen (Mittel der äu-äusserer Einwirkungen), die hier benötigt werden, sinde bestimmte Funktionentypen hilfreich. Diese werden zuerst dargestellt, gefolgt dann durch die spezifische Koeefizienten, wie sie in Kapitel 2, §2.2.2 präzisiert wurden.

Als erstes betrachten wir Funktionen mit den graphischen Darstellungen, wie in Abb. 5.1:

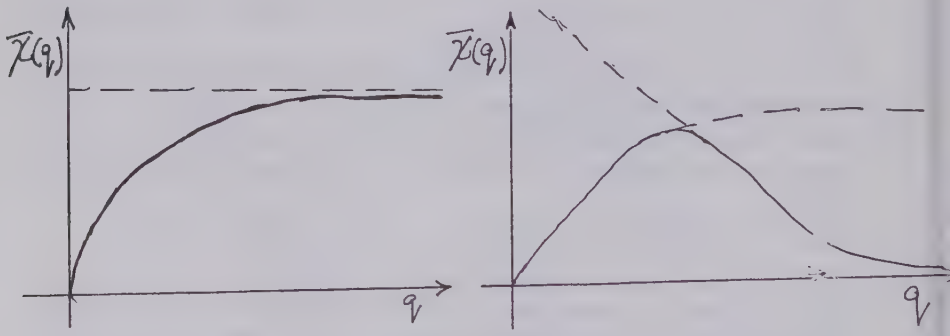


Abb. 5.1

Ist q ein beliebiges Parameter, und $\overline{\chi}(q)$ eine auf der Menge $\{q\} \subset \mathbb{R}$ erklärte Funktion, dann ist

$$q = \tan\left(\overline{\chi}(q)\right) \tag{5.47}$$

eine passende Darstellung für Abb. 5.1a; sie lässt sich durch

$$q \simeq \overline{\chi}(q)\left[\overline{\chi}_T(q) - \overline{\chi}(q)\right]^{-1} \tag{5.48}$$

approximieren, und daraus ergibt sich

$$\overline{\chi}(q) \simeq \overline{\chi}_T(q)\, q\,(1+q)^{-1}; \quad \overline{\chi}_T(q) = \text{const} \tag{5.49}$$

mit der graphischer Darstellung wie in Abb. 5.2 unten

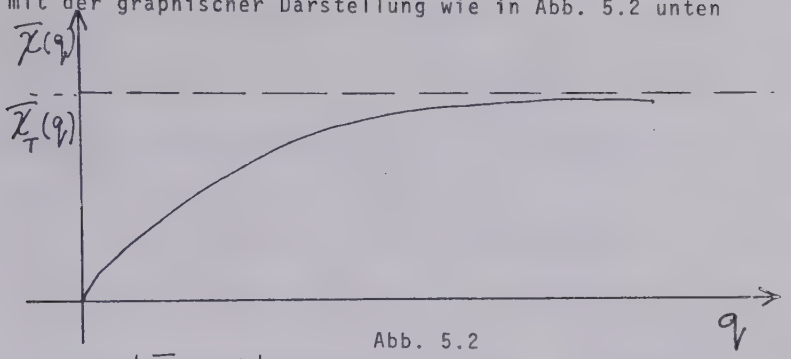


Abb. 5.2

Für alle $|\bar{\chi}_T(q)| < +\infty$, $\bar{\chi}(q)$ ist eine stetige beschränkte Funktion auf der Menge $\{q\} \subset \mathbb{R}$.

Für die graphische Darstellung in Abb. 5.1b gilt folgende, stetige, beschränkte Funktion als passende Darstellung:

$$\bar{\bar{\chi}}(q) \simeq \bar{\bar{c}}\, q \exp(-q) \quad , \quad \bar{\bar{c}} \equiv \text{const.}$$

(5.50)

$$\leq \bar{\bar{c}}\, q (1+q)^{-2} \quad \left[< \bar{\bar{c}}\, q (1+q)^{-1} \right]$$

Für Evolutionsprozessen mit vielen SS (und die Übergänge zulassen sollen) ist es erforderlich, folgende erweitere Form, Abb. 5.3, der Abb. 5.1b zu betrachten:

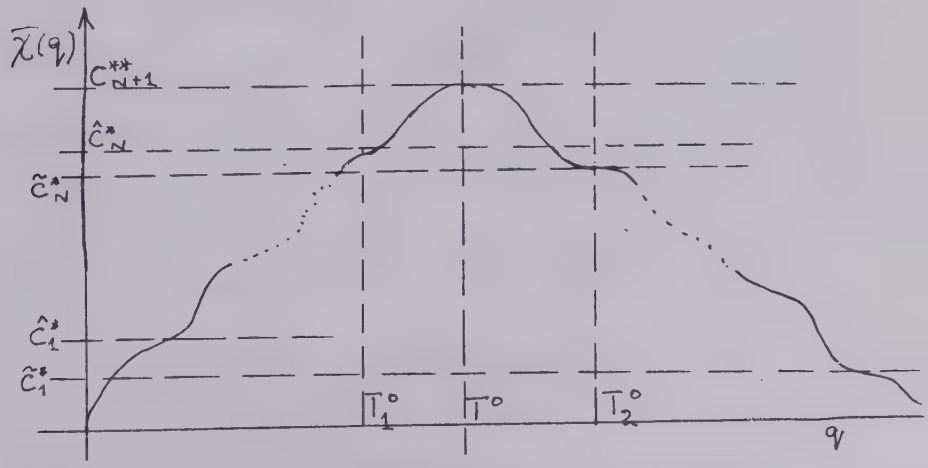


Abb. 5.3

Die Funktion lässt sich im Interval $[0, T_1^0]$ als

$$\hat{C}^*_{r-1} + \frac{\hat{C}^*_r q}{1+q} \qquad r = 1, \ldots, \hat{N};\ \hat{C}^*_0 = 0 \tag{5.51}$$

darstellen, d.h. in der Form von (5.49), und im Interval $[T_2^0, +\infty)$ als

$$\tilde{C}^*_{\hat{N}+1-r} + \tilde{C}^*_{\hat{N}+2-r} e^{-q} \leq \tilde{C}^*_{N+1-r} + \frac{\tilde{C}^*_{\hat{N}+2-r}}{(1+q)^2} \quad r = 1, \ldots, \hat{N} \tag{5.52}$$

Für das Intervall (T_1^0, T_2^0) (Abb. 5.3), führt die graphische Darstellung, Abb. 5.4,

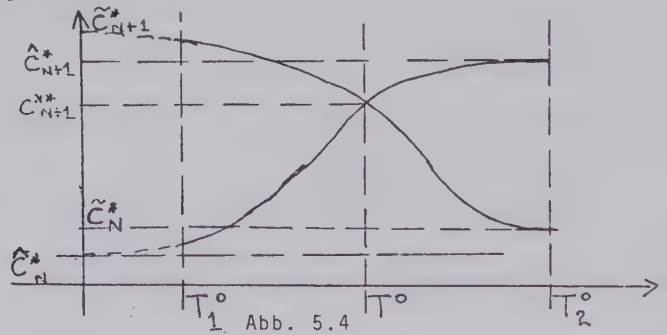


Abb. 5.4

zu folgendem Ausdruck:

$$\left(\hat{C}^*_{\hat{N}} + \frac{\hat{C}^*_{\hat{N}+1} q}{(1+q)}\right)\left(\tilde{C}^*_{\hat{N}} + \frac{\tilde{C}^*_{\hat{N}+1} q}{(1+q)^2}\right) \tag{5.53}$$

Die Herleitung vom Ausdruck (5.53) erfolgt über die detalierten Betrachtungen, die in Abb. 5.5, Seite 227, zu sehen ist:
Daraus ergibt sich folgendes: Mit der passender Auswahl der Parameter $r, \bar{r}$ und $r, \bar{r} = 1, \ldots \hat{N}$.
ist die Funktion mit dem Verlauf in Abb. 5.3 darstellbar als

$$\left(\hat{C}^*_r + \frac{\hat{C}^*_{r+1} q}{1+q}\right)\left(\tilde{C}^*_r + \frac{\tilde{C}^*_{r+1} q}{(1+q)^2}\right) \quad \begin{matrix} r = 1, \ldots, \hat{N} \\ \bar{r} = 1, \ldots, \hat{N}. \end{matrix}$$

(5.54)

$$\left(\hat{C}^*_{\hat{N}+1-\bar{r}} + \frac{\hat{C}^*_{\hat{N}+2-\bar{r}} q}{1+q}\right)\left(\tilde{C}^*_{\hat{N}+1-\bar{r}} + \frac{\tilde{C}^*_{\hat{N}+2-r} q}{(1+q)^2}\right)$$

Eine weitere Verfeinerung für Zwecke von Evolutionsprozessen, wie sie hier betrachtet werden, bildet folgende Betrachtung: Statt der einfachen Form der Extrema (Abb. 5.2 und Abb. 5.3) werden folgende

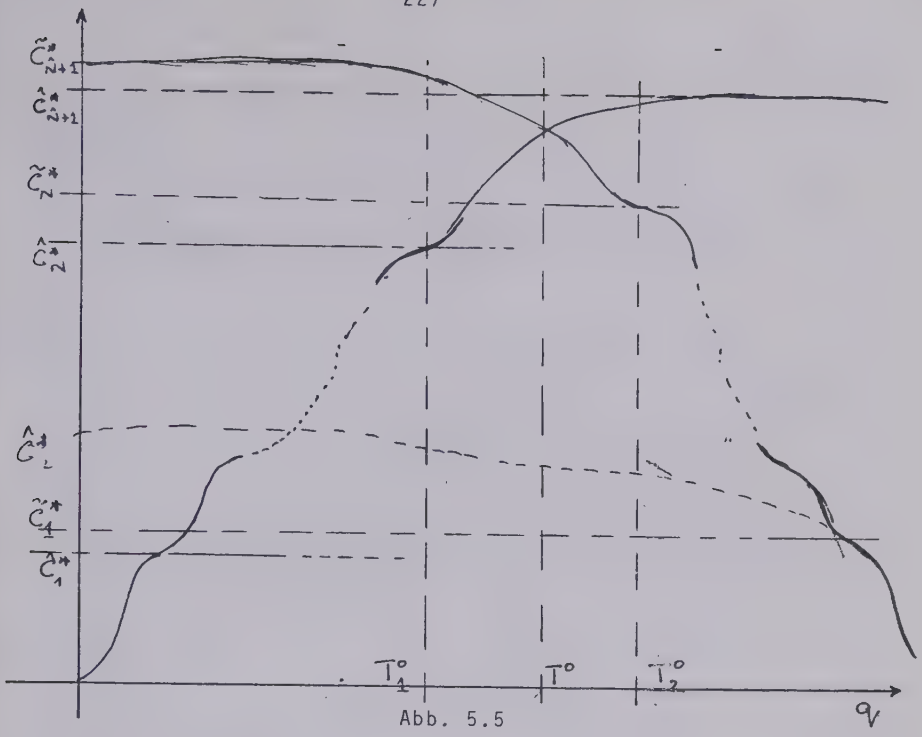


Abb. 5.5

Formen gesucht, Abb. 5.6:

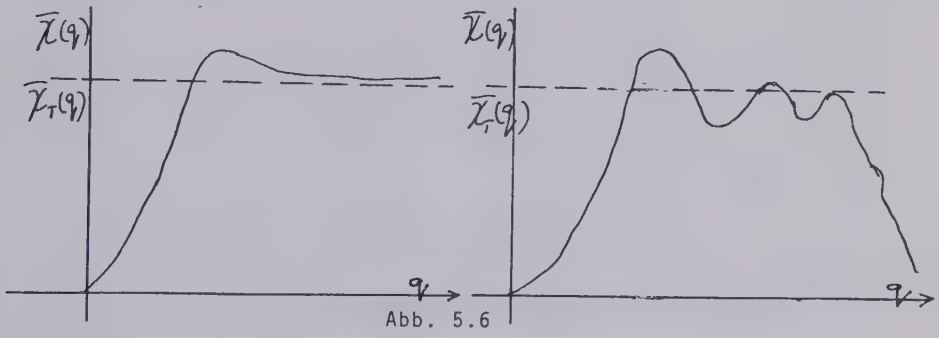


Abb. 5.6

Als eine passende Funktion für Abb. 5.6b gilt

(5.55) $$\tilde{\tilde{k}}\, q\,(1+q)^{-2} + \tilde{\tilde{\mu}}\, q\,(1+q)^{-1}$$

sie hat ein Extremum für

(5.56) $$q = (\tilde{\tilde{k}} + \tilde{\tilde{\mu}})(\tilde{\tilde{k}} - \tilde{\tilde{\mu}})^{-1}\,; \quad \tilde{\tilde{k}} \neq \tilde{\tilde{\mu}}$$

Mit der Forderung

(5.57) $$q \simeq \alpha q^* \qquad |\alpha| < 1$$

, q^* ein genauer, theoretischer Extremumpunkt, ergibt sich

(5.58) $$\tilde{\tilde{\mu}} = \tilde{\tilde{K}}(\alpha q^* - 1)(1 + \alpha q^*)^{-1}$$

Es ist offenbar, daß das 1. Glied im Ausdruck (5.55) das Extremum liefert; wird es allein betrachtet, so ist sein Extremum durch die Bedingung

(5.59) $$\tilde{\tilde{K}}(1+q)^{-2} - 2\tilde{\tilde{K}}q(1+q)^{-3} = 0$$

definiert; dies liefert einen sehr spezifischen Wert für q^*
Daher wird folgende modifizierte Form dieses ersten Gliedes

(5.60) $$\tilde{\tilde{K}}q(1+q)^{-u'}$$

eingesetzt; dadurch ist das Extremum durch

(5.61) $$q = q^* = (u'-1)^{-1}$$

definiert, und liefert, für $q = q^*$

(5.62) $$u' = (q^*+1)(q^*)^{-1}$$

Infolgedessen definiert

(5.63) $$\tilde{\tilde{K}}q(1+q)^{-u'} + \tilde{\tilde{\mu}}q(1+q)^{-1}$$

eine Funktion mit variablem Extremumproblem
Unter Berücksichtigung dieser Verfeinerungen, gehen die Darstellungen in (5.54) über in die Ausdrucke

(5.64) $$\left[\hat{C}_r^* + \frac{\hat{C}_{r+1}^* q}{(1+q)} + \frac{\hat{C}_r^* q}{(1+q)^{-u}}\right]\left[\tilde{C}_r^* + \frac{\tilde{C}_{r+1}^* q}{(1+q)^2}\right]$$

$r = 1, \ldots, \hat{N}$
$\tilde{r} = 1, \ldots, \hat{N}$

$$\left[\hat{C}^{*}_{\hat{N}+1-\bar{\tau}} + \hat{C}^{*}_{\hat{N}+2-\tau}\left(\frac{1}{1+q} + \frac{1}{(1+q)^{u}}\right)\right]\left[\tilde{C}^{*}_{\hat{N}+1-\bar{\tau}} + \frac{\tilde{C}^{*}_{\hat{N}+2-\bar{\tau}}\, q}{(1+q)^{2}}\right]$$

ANMERKUNG 5.6: Für die Ermittlung weiterer Einzelheiten über Schwankungen in einer Umgebung eines SS können Funktionen vom Typ

$$(5.65)\qquad \left[\tilde{\tilde{K}}\, q(1+q)^{-2} + \tilde{\tilde{\mu}}\, q(1+q)^{-1}\right]\left[q(1+q)^{-u}\right]$$

, anstatt (5.63) bzw. (5.55) benutzt werden.

Entsprechend den Definitionen in §2.2.2 sind die explizite Formen der Diffusions- und Relaxationskoeffizienten wie folgt:

a) Der Diffusionskoeffizienten für die Materiedichtefunktion wird, der Definition zur Folge, eine graphische Darstellung haben, wie in Abb. 5.3 dargestellt ist. Somit sind die Ausdrucke in (5.64) die explizite Form dieses Koeffizienten, wobei jeweils q, $\chi(q)$ durch ρ, $D(\rho)$ u.s.w zu ersetzen ist.

b) Gemäß der Definition, ist der Diffusionkoeffizient für die Energiedichtefunktion von der Form in Abb. 5.7:

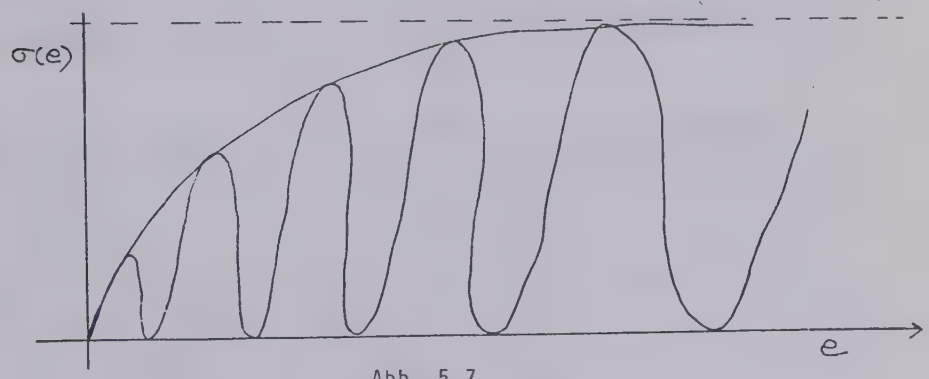


Abb. 5.7

Dies entspricht der linken Häfte der Abb. 5.3, das Bild im Interval $[0, T_2^{0}]$. Die explizite Form des Diffusionskoeffizienten für die Energiedichtefunktion e ist daher wie folgt:

$$(5.66)\qquad \sigma(e) \simeq \left(\sigma_1^{*} + \frac{\sigma_2^{*} e}{1+e}\right)\cdot \sin e$$

wobei e^{*} die Energiedichte am SS bedeutet.

c) Die graphische Darstellung für die gewünschte Form des Relaxationskoeffizienten für die Energiedichtefunktion ist in Abb. 2.18; eine passende Approximation dafür ist

$$\tau(e) \simeq \{\tau^{*} e (1+e)^{-1} \sin e\} \exp e \tag{5.67}$$

(dieser Ausdruck gewinnt man durch Anwendung von (5.49), siehe Abb. 5.2).

d) Für den Relaxationskoeffizienten der Materiedichtefunktion gilt Abb. 2.19, für die

$$\begin{aligned} \eta(\rho) &\simeq |\sin\rho| \exp(-\rho) \\ &\leq |\sin\rho| (1+\rho)^{-2} \end{aligned} \tag{5.68}$$

eine passende Approximation ist; mit $\bar{\bar{c}} = |\sin\rho|$ & $q = \rho$ dies ist der Ausdruck in (5.50).

Für die anderen Dichtefunktionen in der hierarchischen Gliederung benutzt man die hierarchischen Beziehungen unter den entsprechenden Koeffizieten, wie sie in §2.2.2 definiert sind.

5.2.3 ERWEITERUNG DER NICHTLINEAREN GLIEDERN IN SIMULATIONSMODELLE

Die imSeeligschen Modell enthaltenen nichtlinearen Glieder ρ_1 und ρ_2 (siehe Gleichungssysteme (1.7) und (1.8)) werden auch, in Hinblick auf die Modellerweiterungen in §2.3.3 selbst erweitert. Hierzu ist folgendes bezüglich der Seelichen nichtlinearen Glieder zu beachten; es gelten nämlich folgende Abschätzungen:

$$\begin{aligned} \rho_{\iota'} &\leq \phi\gamma \left[1 - \eta_{\iota'} (\xi_{\iota'} + \eta_{\iota'})^{-1}\right] \eta_{\iota'} \\ &\leq \phi\gamma \left[1 - \xi_{\iota'} (\xi_{\iota'} + \eta_{\iota'})^{-1}\right] \xi_{\iota'} \end{aligned} \qquad \iota' = 1, 2 \tag{5.69}$$

Diese Abschätzungen ergeben sich folgendermassen:

$$
\begin{aligned}
\rho_{\iota'} &= \phi\gamma \frac{\xi_{\iota'}\eta_{\iota'}}{1+\xi_{\iota'}+K\xi_{\iota'}^2+\eta_{\iota'}} \qquad \iota' = 1,2 \\
&\le \phi\gamma\, \xi_{\iota'}\eta_{\iota'}[\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'}]^{-1} \\
&\le \phi\gamma\, \tfrac{1}{2}\left[(\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'})^2-\xi_{\iota'}^2-\eta_{\iota'}^2\right][\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'}]^{-1} \\
&\le \phi\gamma\tfrac{1}{2}\left\{(\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'})-[\xi_{\iota'}^2-\eta_{\iota'}+2\eta_{\iota'}^2][\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'}]^{-1}\right\} \\
&\le \phi\gamma\tfrac{1}{2}\left\{(\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'})-(\xi_{\iota'}-\eta_{\iota'})-2\eta_{\iota'}^2[\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'}]^{-1}\right\} \\
&\le \phi\gamma\left[\eta_{\iota'}-\frac{\eta_{\iota'}^2}{\xi_{\iota'}+\eta_{\iota'}}\right]
\end{aligned}
\tag{5.70}
$$

Die 2. Abschätzung in (5.69) wird auf ähnlichen Weise gewonnen.

Durch diese Abschätzungen wird die Schlußfolgerung gezogen, daß die rationelle Funktionen, die die nichtlinearen Glieder des Seeligschen Modells (§1.1) darstellen, grob veranschaulicht, folgendem Konzept entsprechen:

Beteiligungsgewicht eines Elemenst am Treiben der Interaktion $\triangleq$ Dessen Konzentration / Gesamtkonzentrationen aller im Kompartment vorhandenen Element

Dieses Konzept wird zu folgendem Interaktionsprinzip verallgemeinert:

$$
\sum_{j''=1}^{N^*}\sum_{j'=1}^{N^*} \frac{\tilde{c}_{j'}-\tilde{c}_{j''}}{\tilde{c}'}\left[p_{j'}\tilde{c}_{j'}-p_{j''}\tilde{c}_{j''}+(1-p_{j'})(1-p_{j''})\tilde{c}_{j'}\tilde{c}_{j''}\right]^{\bar{m}} \tag{5.71}
$$

$\bar{m} > 1$, $\bar{m}$ - Ordnung der betrachteten Reaktionen, $\tilde{c}' = \tilde{c}_1 + \tilde{c}_2 + \cdots + \tilde{c}_{N^*}$, und $p_{j'}$, $p_{j''}$ bezeichnen die Nichtbeteiligungskoeffizienten (d.h. Koeffizienten für die Teile von Konzentrationen, die nicht an Reaktionen teilnehmen). Für die meisten Fälle (darunter auch stufenweise Approximation bei anderen Fällen) werden $p_{j'} = p_{j''} = 0$ und $\tilde{c}_{j'} - \tilde{c}_{j''} \simeq \text{Const}$ angenommen. Ferner wird auch $\bar{m} = 2$ am allgemeinsten angenommen.

Entsprechend dieser Feststellung ist der Ausdruck

$$\tilde{F}(\bar{\Psi}) = A_1(\bar{\Psi},\bar{\Psi}) + A_2(\bar{\Psi},\bar{\Psi},\bar{\Psi}) + \cdots \quad (5.72)$$

$A_1(\bar{\Psi},\bar{\Psi})$- billineare Formen, $A_2(\bar{\Psi},\bar{\Psi},\bar{\Psi})$ trillineare Formen usw (siehe Hahn [F-9]) die allgemeine Annäherung für die nichtlineare Glieder in den Gleichungen (4.34) bis (4.37), siehe auch die Bedingung (4.38); dies gilt auch für entsprechende nichtlineare Glieder anderswo, insbesondere bezüglich der abgeleiteten Systemgleichungen).

5.2.4 GRUNDFORMEN DER ANZUWENDENDEN IMPULSE

Bestimmend für die Lösung der in dieser Arbeit gestellten Konditionierungsaufgabe ist die Existenz von mindestens drei stationären Zuständen, und der Möglichkeit zwischen diesen zu schalten. Wie bereits in Kapitel 3, §3.1 angetroffen wurde führt dies zur Betrachtung von Reizimpulsen, für die die graphische Darstellung der Abb. 5.8 eine der entsprechenden Alternativen darstellt:

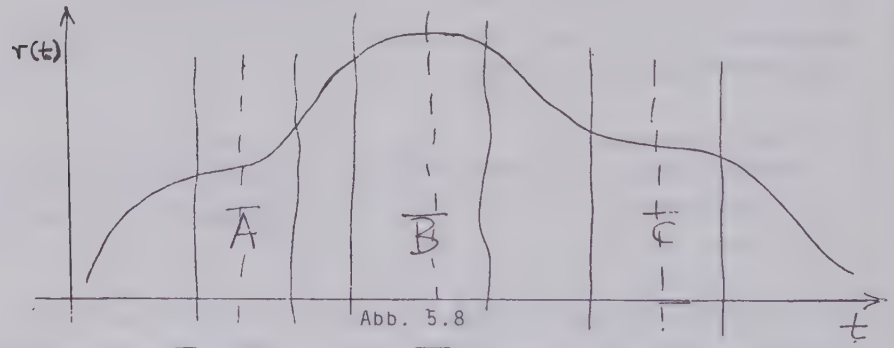


Abb. 5.8

(Die Bereiche $\bar{A}$, $\bar{B}$, and $\bar{C}$ werden als Umgebungen von stationären Zuständen angenommen).
Diese Abbildung entspricht Abb. 5.3; dementsprechend ist

$$r(t) \simeq c_1^{**} + \frac{c_2^{**} t}{1+t} \quad (5.73)$$

eine passende Darstellung für die Reizimpulse, die die Übergänge $\bar{A} \rightleftharpoons \bar{B} \rightleftharpoons \bar{C}$ ermöglichen (siehe auch §5.3.1).
Um Reizwellen in der Form des Ausdrucks (3.7) darstellen zu können, wird der Ausdruck (5.73) durch polynome approximiert; dies ist

stets zulässig, da $r(t)$ beschränkt ist, (Stone-Weierstrasscher Satz, Simmons [F-23]).
Anstatt der üblichen Fourischen Einsatz

$$r(t) \simeq \tfrac{1}{2}\bar{\alpha}_0 + \sum_{k'=1}^{\infty}\left(\bar{\alpha}_{1k'}\cos k't + \bar{\alpha}_{2k'}\sin k't\right) \tag{5.74}$$

wird eine Approximation durch die Tchebycheffsche Methode

$$r(t) = \sum_{k'=0}^{\infty}\bar{\beta}_{k'}T_{k'}(t) \tag{5.75}$$

gesucht. Durch diese Approximation kann die Darstellung (5.73) in der Form von (3.7) formuliert werden.
Zwischen den Fourierschen und Tchebycheffschen Darstellungen existieren folgende Beziehungen, siehe Fox und Parker [G-9] und Rivlin [G-23]:

$$\begin{aligned}\tfrac{1}{2}\bar{\alpha}_0 &= \bar{\beta}_0 T_0(t)\\ \bar{\alpha}_{k'} &= \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}(1-t^2)^{-1}\,r(t')\,T_{k'}(t)\,dt'\end{aligned} \tag{5.76}$$

$$k' = 1, 2, \ldots$$

Zum Schluß soll darin errinert werden, daß diese Funktionen als Randwerte deklariert sind, siehe Kapitel 3.

5.3 Simulationsmodelle

Dieser Abschnitt ist haupsächlich den Iterationen (§§5.3.2 , 5.3.3) gewidmet, die für Näherungslösungen der abgeleiteten DGLen bzw. IGLen notwendig sind. Dafür ist allerdings erforderlich die in Kapitel 3 beschriebene Konditionierungswege näher zu charakterisieren, und, in diesem Zusammenhang, die bisherigen Betrachtungen zusammenzufassen. Die expliziten Darstellungen werden stellvertretend mit der Materidichtefunktion ρ durchgeführt; durch Anwendung von Satz 2.43 (Kapitel 2) lassen sich analoge Formen für die Energiedichtefunktionen $e, \ldots$ herleiten.

5.3.1. DIE KONDITIONIERUNGSVORGÄNGE

An Hand der Materiedichtefunktion ρ ist Abb. 5.9a eine Darstellung für Flip-Flop-Eingenschaft; Abb. 9b ist eine andere Variante:

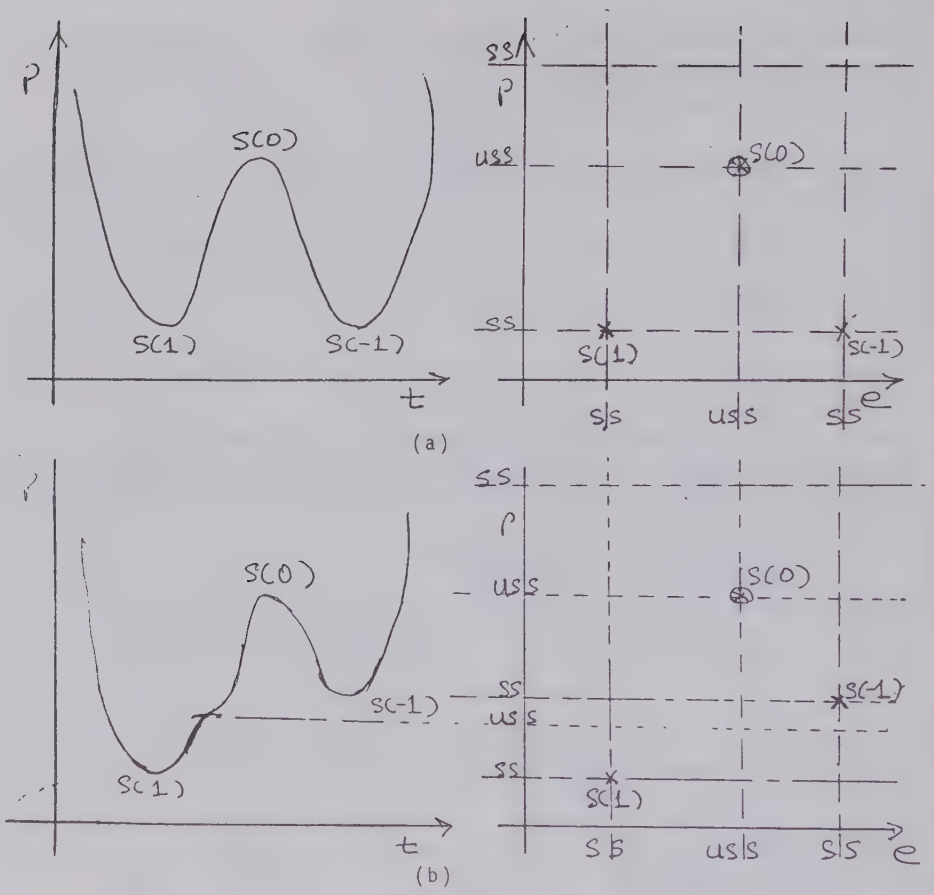


Abb. 5.9

Unter Umständen ist es empfehlenswert, Steady State Problemen von folgender Form (Abb. 5.10)

Abb. 5.10

zu betrachten: In der Umgebung eines Steady State liegen mehrere lokale Minima und Maxima dicht nebeneinander.

Der Einfachheit halber werden die Betrachtungen auf Abb. 5.9a beschränkt; ferner werden analoge Sachverhalte für die Energiedichtefunktionen vorausgesetzt.
Die für Flip-Flop charakteristische Übergänge $S(1) \rightleftarrows S(o) \rightleftarrows S(-1)$ werden erneut auf der $e-\rho-$Ebene betrachtet, Abb. 5.11 unten:

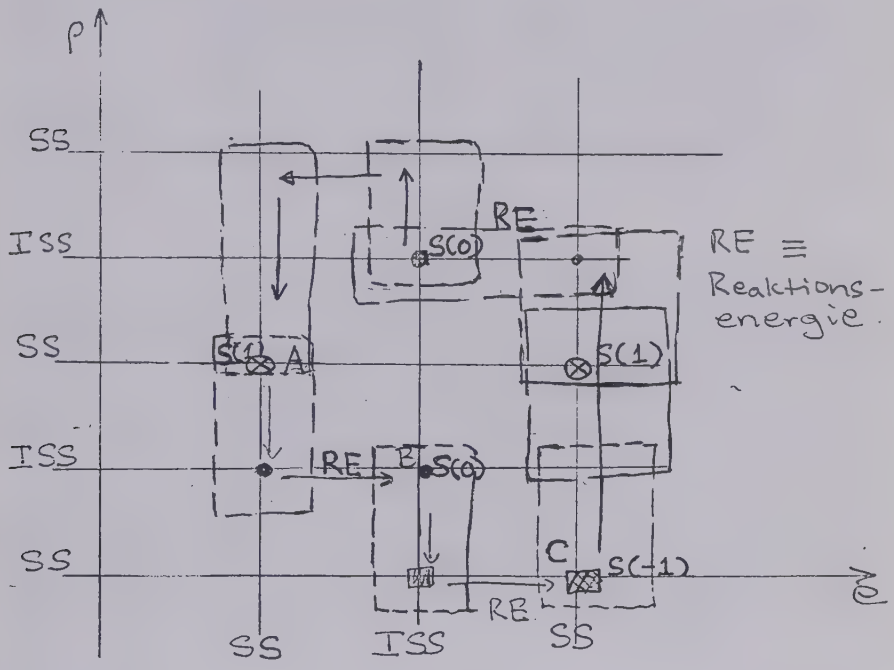


Abb. 5.11

Das NRZ-Modus besteht darin, daß S(1), S(-1) durch äussere Einwirkungen aufrechterhalten werden, wie die Konditionierungswege unten zeigen werden. Die direkten Übergänge sind durch "– – →" in Abb. 5.11 gekennzeichnet, wobei die Wege $S(1) \longrightarrow S(o) \longrightarrow S(-1)$ oder $S(-1) \longrightarrow S(0) \longrightarrow S(1)$ dem Schreiben entspricht, während die Wege der Rückführung zum Ausgangszustand dem Lesen entsprechen. Um Information diskret speichern zu können, werden die durch '⟶' ausgewiesenen Wege vorgeschlagen; sie bieten Zeitverzögerungen an, die am Beispiel chemischer Kinetik als

Informationsträger erörtert werden.

Abbildung 5.12 illustriert die energetischen und materiellen Veränderungen, die die in Abb. 5.11 eingezeichnete Wege aufrechterhalten konnten:

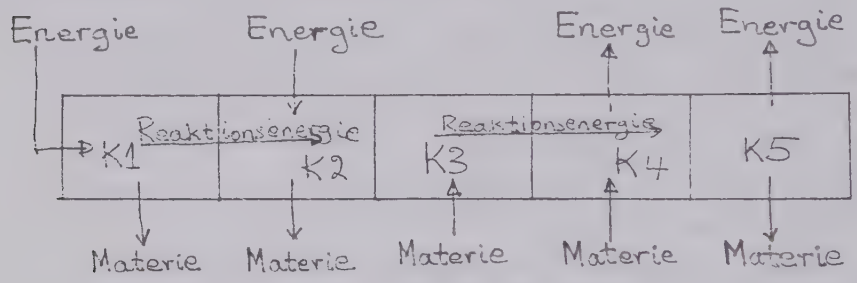


Abb. 5.12

Es wird angenommen, daß jeder Kasten chemische Spezies enthält. Durch leichte energetische Anregung und Materieabfuhr wird die Materiedichte in Kasten K1 destabiliziert, so daß eine Reaktion stattfindet. Die Reaktionsenergie wird zum Antreiben der Reaktionen im benachbarten Kasten K2 abgegeben; während dessen wird die Materiedichte veringert und stabiliziert. Dadurch ergibt sich eine energiereiche Reaktion, die dadurch konserviert wird, daß in Kasten K3 viel Materie schnell zugefügt wird, bis der Zustand S(-1) hergestellt ist. Eine Erhaltung des Zustands S(-1) bedeutet daß die originelle Information (die Anregung in Kasten K1) jetzt als absorbierte Reaktionsenergie konserviert wird (definiert dadurch das Schreiben).

Zum Lesen bzw. Freigabe der Energie, destabiliziert man Kasten K3 durch weiteren Materiezufuhr zur Auslösung einer exothermen Reaktionen; diese Reaktionsenergie treibt eine zweite ähnliche Reaktion in Kasten K4 in den Materie weiter zugeführt wird. Diese freiwerdende Reaktionsenergie kann dan zur Informationserkennung verwendet werden, während der Ausgangszustand von K1 wiederhergestellt wird.

Ein (chemisches) Informationsaggregat mit entsprechenden Zeitverzögerungen für diskrete Informationsübertragungen erhält man wie folgt; Abb. 5.13:

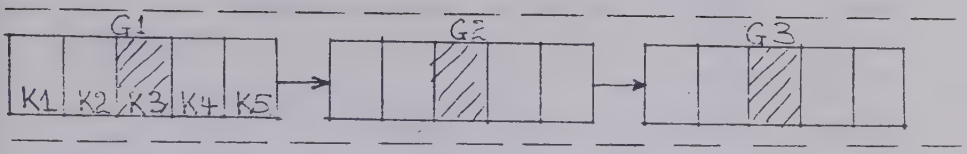


Abb. 5.13

Jede Teilkette oben ist die Kette in Abb. 5.12. Information die in G_{13} konserviert wird und weiter an G_{23} zur Konservierung abgegeben wird, macht G_1 frei für neue Speicherung, während G_{33} noch frei ist. Die Zeit für die Weitergabe von G_1 an G_2 bzw. G_2 an G_3, zusammen mit den Relaxationseigenschaften der Kinetiken ergibt Zeitverzögerungen, die zur Gestaltung diskreter Information (auf der Basis der chemischen Kinetik) genutzt werden kann.

Mit $G_{15} = G_{21}$ und $G_{25} = G_{31}$ ist die Teilketter G_{13} bis G_{33} dem NERU der Nervenfaser ähnlich, falls G_{23} ($\equiv R_o$ des NERU) gerade eine konservierte Information hat, während G_{13} und G_{33} den R_{-4} und R_4 des NERU entsprechen würden. Somit existiert die theoretische Möglichkeit ein durch chemische Kinetik gekennzeichnetes CCD/CTD (Kapitel 2) zu gestalten.

Die Änderungen, von Kasten zu Kasten, in Abb. 5.12 bzw. Abb. 5.13 sind als die vielfach angesprochenen Randwertveränderungen zu verstehen. Für die Zwischenniveaus, IS(1), IS(-1), benutzt man eine leicht deformierte Form der Abb. 5.5, siehe Abb. 5.14 unten:

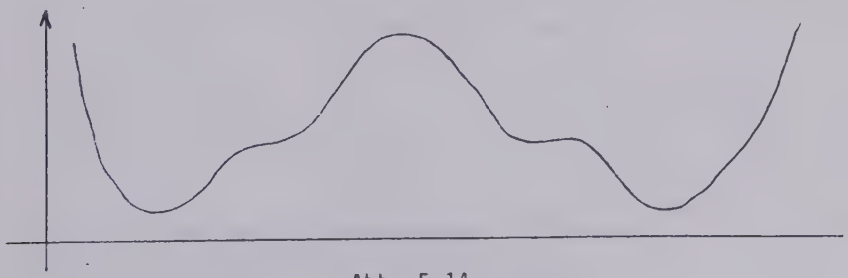


Abb. 5.14

Eine zusammenfassende Darstellung von Abb. 5.12 bzw. Abb. 5.13 durch parallel-verarbeitende Programme erfolgt durch geeignete hierarchische Zerlegung, wie sie in §2.1.3 erörtert wurde.

In jedem der Kasten in Abb. 5.12 bzw. Abb. 5.13 gibt es mindesten einen Übergang zwischen zwei stationären Zuständen.
Ist $[t_0, t^*]$, $t^* < +\infty$ die Zeit für einen entsprechenden Übergang, setze

$$[t_0, t^*] = \bigcup_{\tau=1}^{h} [t_{\tau-1}, t_\tau] \tag{5.77}$$

$$t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_h = t^* < +\infty$$

In jedem Teilinterval $[t_{\tau-1}, t_\tau]$ wird

$$\frac{\partial Z(\epsilon)}{\partial t} \simeq 0 \tag{5.78}$$

vorausgesetzt; (siehe (5.11) oben für $Z(\epsilon)$).
Das Entwicklungssystem für schrittweisen Übergang (über die Zeitintervalle $[t_{\tau-1}, t_\tau]$) ist:

$$\frac{\partial Z^{(\tau)}}{\partial t} + \tau_m(Z^{(\tau)}) \frac{\partial^2 Z^{(\tau)}}{\partial t^2} = D_m(Z^{(\tau)}) \nabla^2 Z^{(\tau)} + \frac{\partial D_m}{\partial Z} (\nabla Z^{(\tau)})^2 + \Phi(\cdots) + F^{(\tau)}(Z, \mu, \cdots) \tag{5.79}$$

Die zugehörigen Nebenbedingungen sind, a) die Anfangswertaufgabe

$$Z^{(\tau)}\Big|_{t=t_\tau} = Z^{(\tau-1)} \tag{5.80}$$

und b) die Randwertaufgabe

$$\alpha \frac{\partial Z^{(\tau)}}{\partial n} + \beta Z^{(\tau)} = \vartheta^{(\tau)} \tag{5.81}$$

Für $\tau = 0$ gelten folgende Zuordnungen:

$$\begin{aligned} \epsilon_{-1} &= 0 \quad \text{für } t = t_0 \\ Z^{(1)} &= \Psi \end{aligned} \tag{5.82}$$

wobei Ψ die Lösung des Erneuerungsproblem ist.
Es seien $\tilde{U}_1$, $\tilde{U}_2$ offene Umgebungsmengen eines stationären Zusatnds (Abb. 5.15 unten) mit

$$\tilde{U}_1 \cup \tilde{U}_2 = \tilde{U}_2, \; \tilde{U}_1 \subset \tilde{U}_2, \; \tilde{U}_1 \neq \tilde{U}_2 \tag{5.83}$$

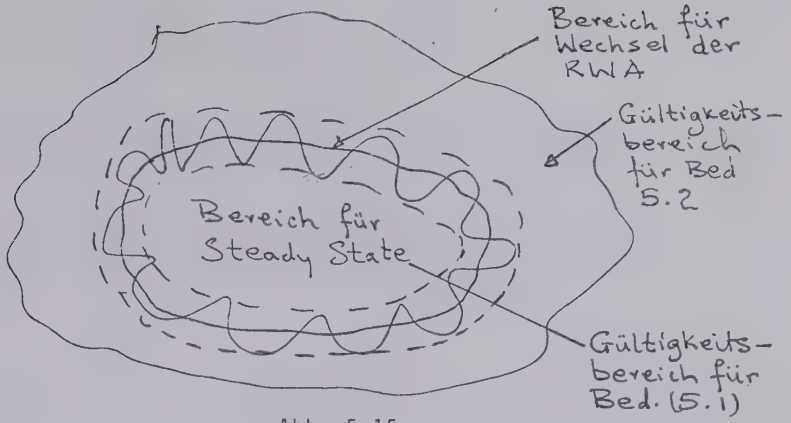


Abb. 5.15

Denn ist die Bedingung $\tilde{\mathcal{U}}_1 \cap \tilde{\mathcal{U}}_2 \neq \emptyset$ erforderlich für die Gültigkeit von Bedingungen (5.1) und (5.2), die den Wechsel von einem Erneuerungssystem in ein Entwicklungssystem darstellt. An der Stelle $\tilde{\tilde{\mathcal{U}}} = \bar{\tilde{\mathcal{U}}}_1 \setminus \tilde{\mathcal{U}}_1$ gibt es eine sprunghafte Veränderung der Randwerte; dies entspricht einer Änderung der energetischen bzw. materiellen Pumpaktionen, wie vorher diskutiert wurde, siehe Kapitel 3.

Das entsprechende Sturm-Liouvillesche System für das System (5.79) bis (5.81) ist:

$$\frac{d}{d\xi}\left(\bar{\bar{\chi}}(\psi^{(\bar{r})})\frac{d\psi^{(\bar{r})}}{d\xi}\right) + \alpha_1^{(\bar{r})}\psi^{(\bar{r})} = \tilde{F}^{(\bar{r})}(\psi^{(\bar{r})}, \mu \cdots)$$

$$\bar{\bar{\chi}}(\psi^{(\bar{r})}) = \left[v^2 \tau(\psi^{(\bar{r})}) - (\omega\cdot\omega) D(\psi^{(\bar{r})})\right] \qquad \alpha_1^{(\bar{r})} = \alpha'^{(\bar{r})}\bar{\chi}^{-1}$$

$$\tilde{F}^{(\bar{r})}(\psi^{(\bar{r})}, \mu, \cdots) = \frac{1}{\bar{\chi}}\left[v\frac{d\psi^{(\bar{r})}}{d\xi} + v^2\frac{\partial\tau}{\partial\psi}\left(\frac{d\psi^{(\bar{r})}}{d\xi}\right)^2\right.$$

(5.84)

$$\left. + \bar{\Phi}^{(\bar{r})}(\cdots) + F(\psi^{(\bar{r})}, \mu) + \alpha'^{(\bar{r})}\psi^{(\bar{r})}\right]$$

$$\psi^{(\bar{r})}\Big|_{\xi = \xi^{(\bar{r})}} = \psi^{(\bar{r}-1)}$$

$$\bar{\beta}_1 \dot{\psi}^{(\bar{r})} + \bar{\beta}_1 \psi^{(\bar{r})} = \mathcal{Q}^{(\bar{r})}$$

Ihre Lösung ist durch die IGL

$$\varphi^{(\bar{\tau})} = f^{(\bar{\tau})} + \lambda^{(\bar{\tau})} K^{(\bar{\tau})} \varphi^{(\bar{\tau})}$$

$$K^{(\bar{\tau})}\varphi^{(\bar{\tau})} = \int_{\xi_{\bar{\tau}-1}}^{\xi_{\bar{\tau}}} G^{(\bar{\tau})}(\xi_{\bar{\tau}} - \xi')\,\tilde{F}^{(\bar{\tau})}(\ldots)\,d\xi' \qquad (5.85)$$

$$f^{(\bar{\tau})} = \mathcal{U}^{(\bar{\tau})}\varphi^{(\bar{\tau}-1)} \qquad \varphi^{0} = \varphi'$$

(vgl. (5.17)).

Die weitere Beschäftigung mit den in diesem Abschnitt gewonnen Gleichungen erfolgt in §5.3.3 unten.

5.3.2 ITERATIONSVERFAHREN FÜR DIE ABGELEITETEN GEWÖHNLICHEN DGLEN

Die Lösung des Hopf-Malkinsche Problem ist die IGL (5.12); (sie dient als Anfangswert für die Lösung des Erneuerungsproblem, das in §5.3.3 als Ergänzung zu §5.1.1 näher beschrieben wird). Unter der Voraussetzung, daß die nichtlinearen Glieder im System (5.7) Bedingungen von Typ (4.38) genügen, ist die Lösung des Systems (5.12) durch die Iteration

$$W_n = W_0^0 + \int_0^{\xi} \tilde{F}(\ldots W_{n-1} \ldots)\,d\xi' \qquad (5.86)$$

bestimmt, wobei

$$W_0^0 = e^{A(\mu_1 \epsilon)(\xi - \xi_0)}\,\bar{\psi}^0 \qquad (5.87)$$

(vgl. (4.79) bis (4.81) auf Seite 193); diese Iteration kann z.B. mit Hilfe des Runge-Kutta-Verfahrens (bzw. dessen entsprechende Erweiterungen) durchgeführt werden, siehe z. B Coddington und Levinson [F-4] und Ince [F 10].

Das Hopf-Malkinsche Problem ist für die Bestimmung der passenden Zusammensetzung der Eigenwerte für das Flip-Flop-Verhalten, wie bereits in Kapitel 4 eingehend erörtert wurde. Für einige Parameter ist die Lösung stabil, für andere instabil. Für entsprechende

Klassifizierung der Eigenwerte und Parameter, betrachtet man

$$V(\bar{\Psi}) = \sum_{j'=1}^{p} \bar{\Psi}_{j'}^2, \quad p = 2N = 4N_1 \tag{5.88}$$

(siehe Lyapunovsche Fuktionen in Nemytskii + Stepanov [F-22]). Dabei ist $\bar{\Psi}$ die durch (5.12) gewonnene Lösung des Hopf-Malkinsche Problems; für bestimmte stabile Lösungen (≡ beschränkte Lösungen) ist durch (5.88) definierte algebraische Fläche invariant, siehe Gurevich [N-30] . Diese Fläche hat die DGL

$$\dot{V}(\bar{\Psi}) = \sum_{j'=1}^{p} 2\,\bar{\Psi}_{j'}\,\dot{\bar{\Psi}}_{j'}, \quad \dot{V}(\bar{\Psi}) = \frac{dV(\bar{\Psi})}{d\xi} \tag{5.89}$$

als ihre 'Bewegungsgleichung'; durch geeignete Umformulierung kann sie in die Form

$$\dot{V}(\bar{\Psi}) = \bar{\nu} V + \tilde{H}(\tilde{\Psi}, \xi, \mu, \sigma, D, \eta, \ldots \tilde{F}) \tag{5.90}$$

überführt werden, wobei alle nichtlineare Glieder in $\tilde{H}(\cdots\cdots)$ zusammengefasst sind, und

$$\bar{\nu} = c^* \,\text{Spur}\, A(\mu,\epsilon) \quad c^* = \text{Const} \tag{5.91}$$

Die Stabilität bzw. Invarianz von $V(\bar{\Psi})$ erfordert die Bedingung

$$\bar{\nu} < 0 \text{ , d.h } \text{Spur}\, A(\mu,\epsilon) < 0 \tag{5.92}$$

Die umgekehrte Vorzeichen in (5.92) ergibt instabile Fläche, so daß

$$\bar{\nu} = 0, \text{ d.h } \text{Spur}\, A(\mu,\epsilon) = 0 \tag{5.93}$$

eine kritische Parametergröße darstellt, die die Bedingung für einen Verhaltensübergang definiert.
Die Bedingung (5.93) ist wichtig: Es soll beachtet werden, daß $A(\mu,\epsilon)$ Teile der systembeeinflüssende Parameter enthält. Somit definiert (5.93) eine Parametergleichung; weitere Parametergleichungen erfolgen jetzt unten.

Die Lösungen, die für das Hopf-Malkinsche Problem gesucht sind, sind diejenigen, die in die Variable ξ periodisch sind, siehe Kapitel 3 und 4. Mit anderen Wörten, Lösungen, für die

$$V(\xi + \xi^*) = V(\xi) \tag{5.94}$$

gilt, wobei ξ^* eine (vorerst angenommene) Periode darstellt. (Die Bedingung (5.94) wird durch die die Bedingung $\psi(\xi + \xi^*) = \psi(\xi)$ für Ebene-Wellen induziert).
Die Lösung der DGL (5.90) ist die IGL

$$V(\bar{\psi}) = e^{\bar{\nu}\xi} V^\circ + \int_{\xi_0}^{\xi} e^{\bar{\nu}(\xi - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' \qquad (V^\circ = V(\bar{\psi}(\xi_0))) \tag{5.95}$$

Aus der Bedingung (5.94) ergibt sich

$$I(\xi, \xi', \bar{\nu}, \bar{\psi}, \ldots\ldots\ldots) \simeq 0 \tag{5.96}$$

wobei

$$I(\xi_1, \xi', \bar{\nu}, \bar{\psi}, \ldots\ldots) \simeq 0$$

$$= V(\xi + \xi^*) - V(\xi)$$

$$= \left[e^{\bar{\nu}\xi_1}(e^{\nu\xi^*} - 1)\right] V^\circ$$

$$+ \int_{\xi_0}^{\xi_1} \left[e^{\bar{\nu}(\xi_1 - \xi)}(e^{\nu\xi^*} - 1)\right] \tilde{H}\, d\xi' \tag{5.97}$$

$$+ \int_{\xi_1}^{\xi^*} e^{\nu\xi_1^*} e^{(\xi_1 - \xi^*)\bar{\nu}}\, \tilde{H}\, d\xi'$$

$$= \left[e^{\nu\xi^*} - 1\right] V(\xi_1) + e^{\bar{\nu}\xi^*} \int_{\xi_1}^{\xi^*} e^{(\xi_1 - \xi')\bar{\nu}} \tilde{H}\, d\xi'$$

und $\xi = \xi_1 \in [0, 1]$ ist ein (beliebiger) Phasenwert, für den die Bedingung (5.94) erfüllt ist.
Der 2. Ausdruck in (5.97) kann folgendermassen umformuliert werden:

$$
\begin{aligned}
& e^{\bar{v}\xi^*} \int_{\xi_1}^{\xi^*} e^{\bar{v}(\xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' \\
&= \int_{\xi_0}^{\xi^*} e^{\bar{v}(\xi^* + \xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' - e^{\bar{v}\xi^*} \int_{\xi_0}^{\xi_1} e^{\bar{v}(\xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' \qquad (5.98) \\
&= \int_{\xi_0}^{\xi^*} e^{\bar{v}(\xi^* + \xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' - e^{\bar{v}\xi^*} \left[V(\xi_1) - e^{\bar{v}\xi_1} V^0 \right]
\end{aligned}
$$

Daraus resultiert

$$
\begin{aligned}
& I(\xi_1, \xi^*, \bar{v}, \bar{\Psi}, \dots\dots\dots) \\
&= \left[e^{\bar{v}\xi^*} - 1 \right] V(\xi_1) - e^{\bar{v}\xi^*} \left[V(\xi_1) - e^{\bar{v}\xi_1} V^0 \right] \\
&\qquad + \int_{\xi_0}^{\xi^*} e^{v(\xi^* + \xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' \qquad (5.99) \\
&= \int_{\xi_0}^{\xi^*} e^{\bar{v}(\xi^* + \xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' + \left[e^{\bar{v}(\xi^* + \xi_1)} V^0 - V(\xi_1) \right]
\end{aligned}
$$

Für alle $\bar{v}$, die der Bedingung (5.92) genügen gilt

$$
\begin{aligned}
& e^{\bar{v}\xi^*} e^{\bar{v}\xi_1} V^0 - V(\xi_1) \leq e^{\bar{v}\xi_1} V^0 - V(\xi_1) \\
&= - \int_{\xi_0}^{\xi_1} e^{v(\xi_1 - \xi')} \tilde{H}\, d\xi' \qquad (5.100)
\end{aligned}
$$

Da $\xi_1 \in [0, 1]$ beliebig ist, ergibt sich aus (5.99) und (5.100) die Bedingung

$$I(\xi^*, \xi, \xi_0, \bar{v}, \bar{\Psi}, \dots)$$

(5.101)
$$\leq \int_{\xi_0}^{\xi^*} e^{\bar{v}(\xi^* + \xi - \xi')} \tilde{H} \, d\xi' - \int_{\xi_0}^{\xi} e^{\bar{v}(\xi_1 - \xi')} \tilde{H} \, d\xi'$$

Die Stabilität von $V(\bar{\Psi})$ hat zur Folge, daß $\min I(\xi^*, \xi, \xi_0, \bar{v}, \bar{\Psi}, \dots) \simeq 0$ gilt. Mit anderen Wörten: Man bestimme die Parameter ξ^*, $\bar{\mu}$ in $A(\bar{\mu})$ ... für die $\min I(\xi^*, \xi, \xi_0, \bar{v}, \bar{\Psi}, \dots) \simeq 0$ in (5.101) stets erfüllt ist.

Die notwendige Bedingung dafür sind bekanntlich die Euler-Lagrangesche Gleichungen; sie lauten

(5.102)
$$\frac{\partial \hat{H}_{\iota'}}{\partial \bar{\Psi}_{\kappa'}} - \frac{d}{d\xi}\left(\frac{\partial \hat{H}_{\iota'}}{\partial \Psi_{\kappa'}}\right) = 0 \qquad \kappa' = 1, \dots, 2N \qquad \iota' = 1, 2$$

wobei

(5.103)
$$\hat{H}_1 = e^{\bar{v}(\xi^* + \xi - \xi')} \tilde{H}$$
$$\hat{H}_2 = e^{\bar{v}(\xi - \xi')} \tilde{H}$$

(siehe Gelfand und Formin [N-31], und Sagan [N-16]). Die Darstellung (5.102) ist zulässig, weil

$$\min I(\xi^*, \xi, \xi_0, \bar{v}, \bar{\Psi}, \dots) \leq \min \int_{\xi_0}^{\xi^*} \hat{H}_1 \, d\xi' - \min \int_{\xi_0}^{\xi} \hat{H}_2 \, d\xi'$$

Ein Nebenprodukt dieser Variationsrechnung ist die Erzeugung einer Variationsgleichung für Trennfläche: Da die Trennfläche durch die Bedingung (5.93) gegeben ist, reduziert sich die Gleichung (5.101) auf

(5.104)
$$I(\xi^*, \dots) \leq \int_{\xi_0}^{\xi^*} \tilde{H} \, d\xi' - \int_{\xi_0}^{\xi} \tilde{H} \, d\xi' = \int_{\xi}^{\xi^*} \tilde{H} \, d\xi'$$

Die Euler-Lagrangesche Gleichungen sind zwar wie in (5.102), aber

(5.105)
$$\hat{H}_1 = \hat{H}_2 = \tilde{H}$$

Die Würzel von $\text{Spur}\, A(\mu) = 0$ sind mit Hilfe des Tchebycheffschen Einsatzes (vgl. (5.27) bis (5.36)) zu bestimmen.

Das Glied $\tilde{H}(\bar{\Psi}, \ldots)$ in den Variationsgleichungen enthält die nichtlineare Glieder des (originalen) Systems, und auch die Matrix $A(\mu)$ (durch die zur Gleichung (5.90) führende Umformulierungen).

Somit ergibt sich: Neben der Gleichung bzw. den Gleichungen eines stationären Zustandes, sind Nebenbedingungen von Typen (5.92), (5.93), (5.102) und (5.105) notwendig für die numerische Simulierung der Lösung des Hopf-Malkinsche Problems, und zur Einteilung der Lösungen bzw. Eigenwerte, Parameter in die oben hier behandelte Klasse. Durch diese Nebenbedingungen sind die Parameterräume etwas eingeschränkt; (siehe §5.4.3 unten für weitere Kommentare).

Der Anfangswert für das Hopf-Malkinsche Problem ist entweder durch empirische Versuche bekannt, oder es muss gewählt werden. Für die in dieser Arbeit gestellte Aufgabe liefern die Werte des Seeligschen Universaloszillators die anfanglichen Närungswerte für den Übergang von System (1.9) auf System (1.10) und dessen Erweiterung wie sie in Kapitel 2 entwickelt wurde. (Für den Fall, daß man keinerlei Anhalspunkte hat, so ist das Problem losbar, aber dafür im Sinne einer inversen Fragestellung - das sogennate 'Inverse Parameter Estimation Problems', das in diesem Rahmen nicht behandelt werden kann).

5.3.3 ITERATIONAVERFAHREN FÜR DIE ABGELEITETEN IGLen DER ERNEUERBAREN ENTWICKLUNGSSYSTEME

Dieser Abschnitt ist der iterativen Lösung von IGLen gewidmet, Das Verfahren ist dasselbe sowohl für die IGL des Erneurungssystem (5.17) und die des Entwicklungssystem (siehe unten hier und (5.79) bis (5.81) oben). Die IGLen für Erneuerungs- und Entwicklungssysteme unterscheiden sich nur in die Anfangs- und Randwerten, die für die Iterationen gebraucht werden.

Die iterative Lösung für die IGL (5.17) ist durch

(5.107) $$\varphi = f^{**} + \int \Gamma(\xi, \xi') \hat{F}(\cdots) d\xi'$$

wobei $$\Gamma(\xi, \xi') = \sum_{s=0}^{\infty} \bar{\lambda}^{s-1} K_s(\xi, \xi')$$

(5.108) $$K_{s'}(\xi, \xi') = \int_{\xi_0}^{\xi} K(\xi, \xi'') K_{s'-1}(\xi'', \xi') d\xi'' \qquad s' \geq 2$$

der Resolvente darstellt und der Anfang der iterierten Kernel $K_1(\xi, \xi')$ die Greensche Funktion darstellt, mit deren Hilfe die ursprüngliche Sturm-Liouvillsche Gleichung (5.15) mit der Nebenbedingung (5.14) in die IGL (5.17) überführt wurde.
Es ist zu beachten, daß

(5.109) $$\bar{\lambda} < \frac{1}{\tilde{M}(\xi - \xi_0)}$$

und

(5.110) $$\left| \int_{\xi_0}^{\xi} K(\xi, \xi') d\xi' \right| \leq \tilde{M}(\xi - \xi_0)$$

wobei $\tilde{M}$ die Lipschitz-Konstante der Kernel $K(\xi, \xi')$ ist, siehe Kantarovich und Kyrylov [G-15].

Der Vorteil der suksessive Approximation von IGLen von Typ (5.17) liegt darin, daß die gewonnene Lösung fortsetzbar ist. Dies ist eine wesentliche Voraussetzung für Übergänge zwischen zwei stationären Zuständen. Der Übergang zwischen zwei stationären Zuständen ist laut Kapitel 2 bis 4 durch ein Entwicklungssystem gegeben und seine allgemeine Form ist:

(5.111) $$\frac{\partial Z}{\partial t} + \tau_M(Z) \frac{\partial^2 Z}{\partial t^2} = D(Z) \nabla^2 Z + \frac{\partial D}{\partial Z} (\nabla Z)^2 + \Phi(\cdots) + \bar{F}(Z, \mu)$$

Und die zugehörigen Nebenbedingungen sind

(5.112) $$Z\big|_{t=t_0} = Z^0$$

(Anfangswertaufgabe), und

$$\alpha \frac{\partial Z}{\partial n} + \beta Z = b \tag{5.113}$$

(Randwertaufgabe).

Mit der Substitution (5.4) lässt sich ein Sturm-Liouvillsche System von Typ (4.119) für (5.111) herleiten, mit den Anfangs- und Randwertaufgaben

$$\begin{aligned} \psi|_{\xi=\xi_0} &= \psi^0 \\ \alpha\omega \cdot \frac{d\psi}{d\xi} + \beta\psi &= \nu^{\zeta} \end{aligned} \tag{5.114}$$

wobei ψ^0 die Lösung von (5.17) ist.

Da $\xi = \omega \cdot x - \nu t$, existieren $\xi^0 < \xi_1^0 < \dots < \xi_n^{\infty}$ für die das Gleichungssystem (5.84) die Einschränkung eines Entwicklungssystem auf die Zeitintervalle in (5.77) darstellt. Dies ist allerdings nur richtig für verschiedene $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ $1 \le d \le 3$, da $t = [\xi - \omega \cdot x]\nu^{-1}$. Mit anderen Wörten, die verschiedenen Raumlagen, für die die erstrebte Konditionierungshergänge wahrscheinlich sind.

Die Lösung der IGL von Typ (5.85) lautet

$$\begin{aligned} \varphi^{(\bar{r})} &= \tilde{f}^{(\bar{r})} + \int \Gamma^{(\bar{r})}(\xi,\xi')\tilde{F}^{(\bar{r})}(\dots)d\xi' \\ \Gamma^{(\bar{r})} &= \sum (\bar{\lambda}^{(\bar{r})})^{s-1} K_s^{(\bar{r})}(\xi,\xi') \\ K_s^{(\bar{r})}(\xi,\xi') &= \int_{\xi_0}^{\xi} K^{(\bar{r})}(\xi,\xi'') K_{s-1}^{(\bar{r})}(\xi'',\xi')d\xi'' \end{aligned} \tag{5.115}$$

(vgl. (5.107) bis (5.110); siehe Chambers [3-4], Delves et al [3-6], Kantarovich und Kyrylov 3-15, Michlin 3-18 für Lösungsmethode für IGLen.

Der 1. Anfangswert der obigen Iteration ist die Lösung des Erneuerungssystem in der Umgebung $\mathcal{U}_1$ (Abb. 5.15) eines stationären Zusatndes. Für die Fortsetzung der Iteration (5.115) als Übergang von einem stationären Zustand zu anderem erweitert man die Konstruk-

tionen (4.93) bis (4.96) mit Hilfe von Abb. 5.15 wie folgt, Abb. 5.16:

Abb. 5.16

Die Menge $\mathcal{U}_1(\psi^0)$ wird folgendermassen zerlegt:

$$\mathcal{U}_1(\psi^0) \subseteq \bigcup \mathcal{U}_{1s'}(\psi) \tag{5.116}$$

wobei

$$\mathcal{U}_{1s'}(\psi^0) = \left\{ \psi' \middle| |\psi_1^0 - \psi_1^0| \leq K^0 + |\varepsilon|,\ |\varepsilon| \to 0 \right\}$$

$$K^0 + |\varepsilon| = \sum_{s'=1}^{n'} \delta_{s'} \qquad |\varepsilon| \longrightarrow 0 \tag{5.117}$$

(Für K^0 siehe (4.93) und für $\mathcal{U}_1(\psi^0)$ (4.94) in Kap. 4).
Ferner betrachtet man die Mengen

$$\tilde{\mathcal{U}}_{1s'}(\psi) = \left\{ \psi' \middle| |\psi_{1s'} - \psi_{2s'}| \leq \delta_{s'} + \tilde{\varepsilon}_{s'} \right\}$$

$$\bar{\tilde{\mathcal{U}}}_{1s''}(\psi) = \left\{ \psi' \middle| |\psi_{1s''} - \psi_{2s''}| > \delta_{s'} + \tilde{\varepsilon}_{s'} \right. \tag{5.118}$$

Damit ist offenbar:

$$\tilde{\mathcal{U}}_{1s'} \cap \bar{\tilde{\mathcal{U}}}_{1s''} \neq \emptyset \tag{5.119}$$

(vgl. $\bar{\mathcal{U}}_1 \cap \bar{\mathcal{U}}_2 \neq \emptyset$ bzgl. Abb. 5.15).
Für die Erzeugung dieser Menge (bzw. Schritte des Übergangsverfahrens) werden die Eigenschaften von Diffusions- und Relaxationskoeffizienten (siehe Kapitel 2, §2.2.2, Seite 58) herangezogen; hierzu:

a) Für die Menge $\tilde{\mu}_{1s'}$ benötigt man

(5.120) $$\frac{\partial^{r'} D}{\partial \rho^{r'}} , \frac{\partial^{r'} \sigma}{\partial e^{r'}} \quad u.s.w = 0 \quad r' = 1,2, \ldots \bar{n} \geq 1$$

für diese Bedingungen, bleibt (5.109) weiterhin erfüllt.

b) Mit Hilfe von

(5.121) $$\frac{\partial^{r'+1} D}{\partial \rho^{r'+1}} , \frac{\partial^{r'+1} \sigma}{\partial e^{r'+1}} \quad u.s.w \neq 0$$

wird die Iteration auf $\bar{\bar{\mu}}_{1s''}$ fortgesetzt.
Es ist zu beachten, daß die Bedingungen (5.120) und (5.121) auf die Zerlegungen der Mengen $\mu_2(\psi^0)$ und $\mu_s(\psi^0)$ in (4.95), Kapitel 4, hinaus.

c) Mit der Wahl

(5.122) $$2\delta_{s'} \leq \frac{K^0 + |\varepsilon| - \delta_1}{n'}$$

wird stets gesichert, daß

(5.123) $$\bar{\bar{\mu}}_{1s''} \cap \tilde{\mu}_{1s_1''} \neq \emptyset$$
$$s'' \neq s_1'' \quad s'', s_1'' = 1, \ldots, n'$$

Es soll beachtet werden, daß gerade die Bedingungen in (5.120) die Unterschiede zwischen dem Hopf-Malkicshen Problem und dem Erneuerungssystem darstellt; dabei sind die entsprechenden Veränderungen an die Randwertaufgaben zu berücksichtigen.

Es ist leicht nachprüfbar, daß doppelte Iterationen, wie sie in Kapitel 4, §4.3, eingehend besprochen wurde, stets erforderlich sind. Will man die Lösung des Erneuerungssystem bestimmen, so ist naben der iterativen Lösung durch (5.107), die iterative Lösung (5.87) zu bestimmen, wobei die letztere die Anfangswertaufgabe definiert. Sinngemäß ist eine doppelte Iteratione erforderlich für die Betsimmung der Übergänge zwischen stationären Zuständen mit Hilfe des Entwicklungssystem, dessen Anfangswert die Lösung des Erneuerungssystem ist.

Eine Zusammenfassung dieser Betrachtungen wird im nächsten Abschnitt §5.3.4 benutzt, um Vorgehensweisen bzw. Schritte bei Simulierungen

von Konditionierungsvorgängen aufzuzeichnen; dabei werden die Abschnitte, in die die Aufgabe aufgeteilt wird abermals betont.

In den IGlen, die für die Erneuerungs- und Entwicklungssysteme gewonnene wurden (5.17) bzw. (5.85) sind f bzw $f^{(\mp)}$ stets Anfangswerte der beschriebenen Iterationen. Aber f bzw. $f^{(\mp)}$ sind durch die Randwertaufgabe definiert; mit anderen Wörten: Die urprünglichen Randwertaufgabe transformiert sich in eine Anfangswertaufgabe bei den abgeleiteten IGLen (siehe Anhang §A3), wie bereits in Kapitel 3 angedeutet wurde. So daß der Wahl dieser Werte eine Steuereungsfunktion bei der Simulierung zukommnt. (Die hier gemeinte Transformation der Randwertaufgabe in Anfangswertaufgabe unterscheidet sich gründsächlich von der mehr direkten Transformation, die etwa in Babuska et al, [N-32] Kapitel 4, behandelt wird). Siehe auch §5.4.3 für wieter Kommentare.

5.3.4 ABRISSE DES FLUßDIAGRAMS FÜR EINE SIMULATION

Um einen Abriß der wichtigsten Schritte für Simulierungsversuche geben zu können, fassen wir die Hauptpunkte der numerischen Betrachtungen zusammen: Drei Hauptroutines sind erforderlich:

a) Ein HMP-Routine (Hopf-Malkin Problem Routine)- dadurch muß sicher gestellt werden, daß das das Reaktion-Diffusions-System, das dem Seeligschen Modell erweitert, mehrfache Steady States besitzt, zumindest drei, zwei stabilen und einen instabilen; hierzu werden benötigt:

   1) Matrizen-Subroutines (Multiplikation, Eigenwerte)
   2) Subroutines zur Ermittlung von Nullstellen von Polynomen
   3) Runge-Kutta Subroutine.

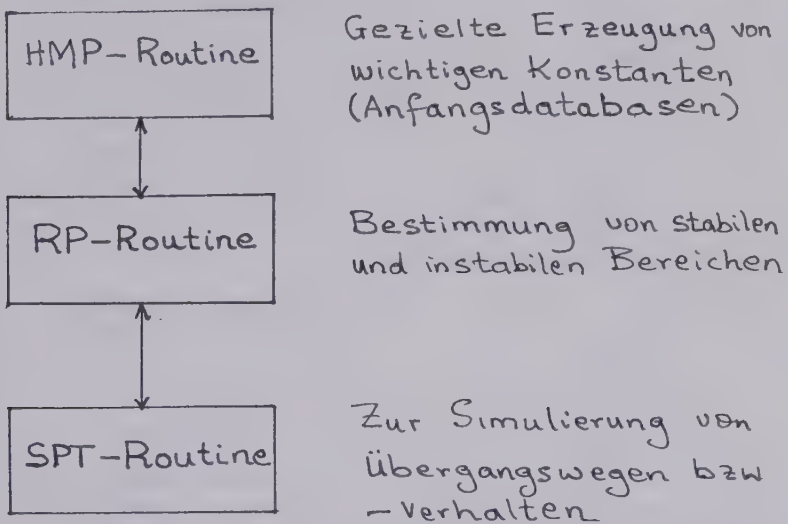
Aus diesen Schritten ergeben sich verschiedenen Werten von von den Diffusions- und Relaxationskoeffizienten und anderen Parametern.

b) Ein RP-Routine (Renewal Problem Routine): Dies ist ein Routine zur Lösung des Erneuerungsproblem mit Hilfe von (5.87) und Anfangswerten, die durch das HMP-Routine bereitgestellt werden. Die Werten, die sowohl aus dem Seeligschen Ausgangsmodell (siehe Seelig [A-61]) stammen als auch vom HMP-Routine werden durch Anlehnung an die Methode der Variation von Para-

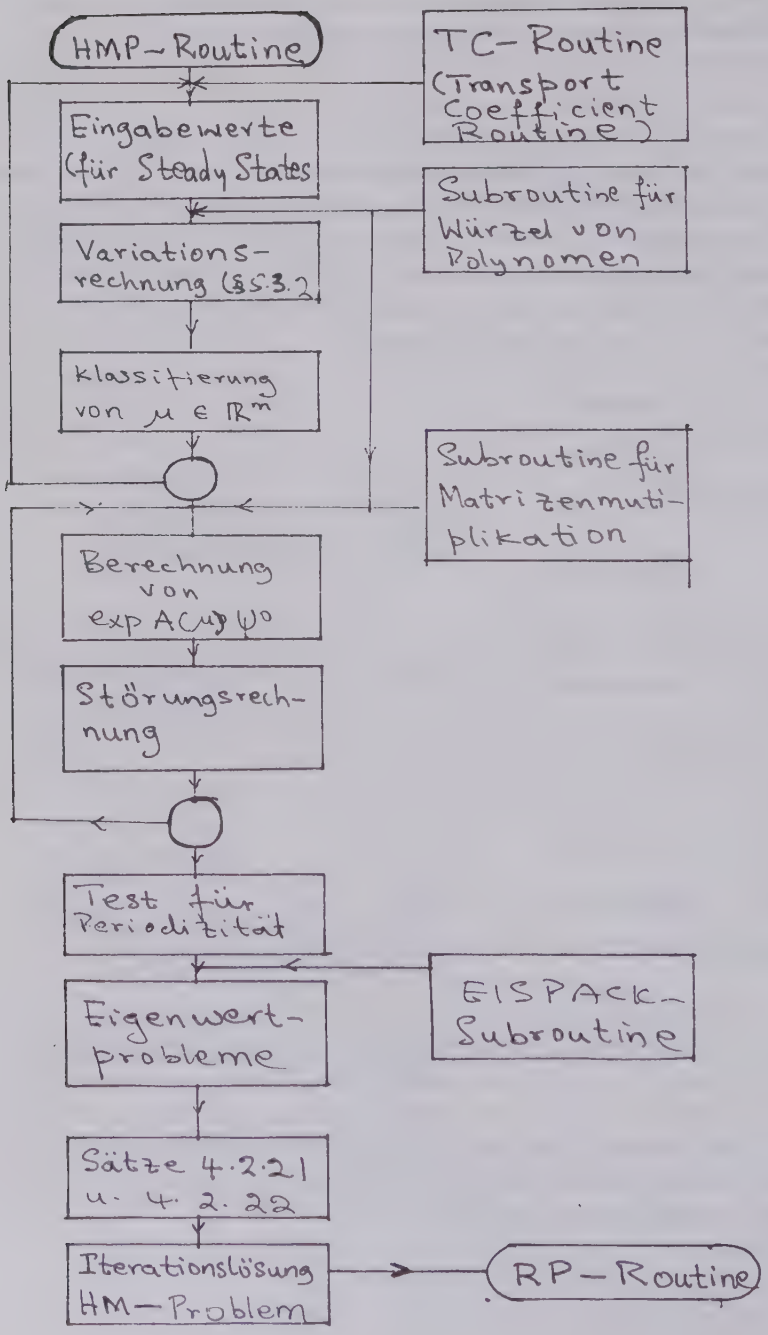
metern (Ince [F-10] , Seite 218 bis 222) variiert, so daß algebraische Gleichungen als Nebenbedingungen entstehen. Die Diffusions- und Relaxationskoeffizienten werden allerdings gemäß (5.120) variiert.

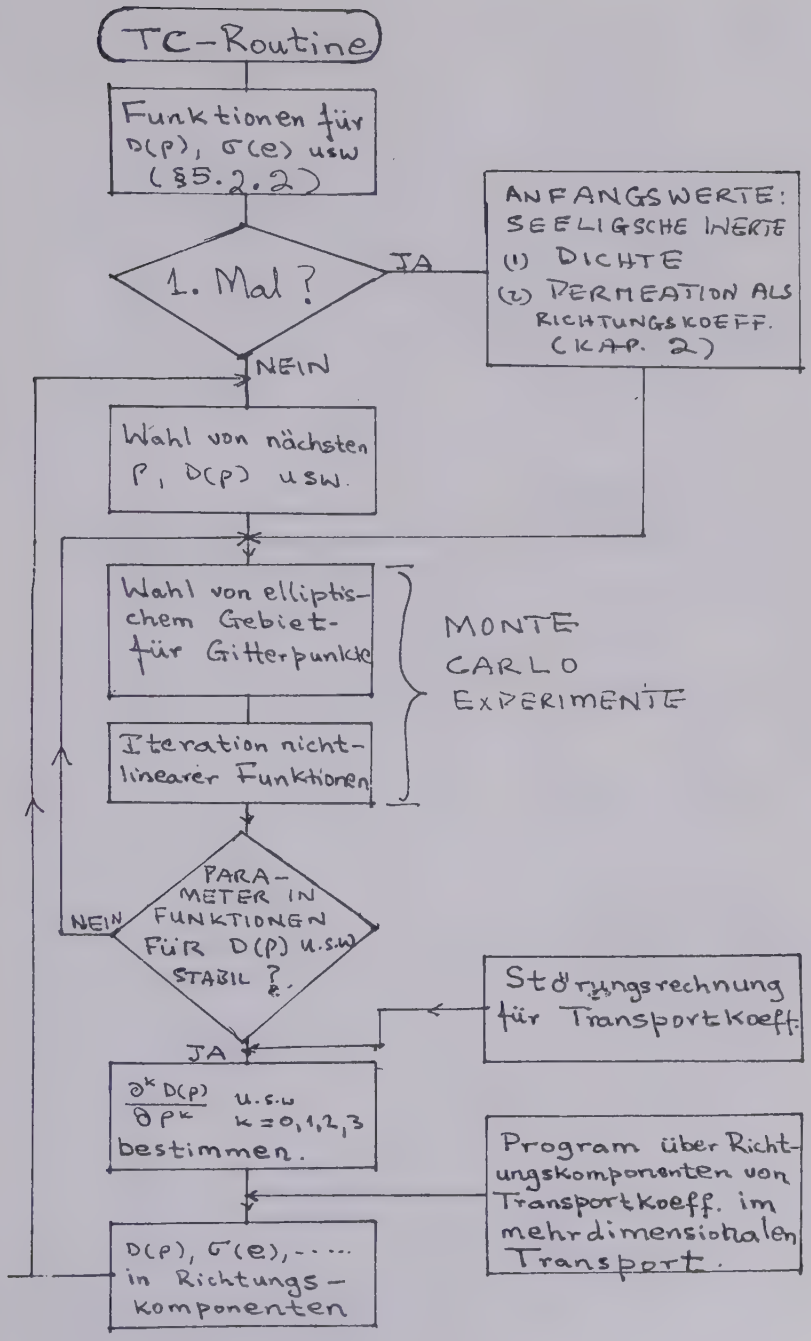
c) Ein SPT-Routine (Structured Pattern Transfer Routine): Hier werden die Übergangsprobleme behandelt. Zur Interpretation im orginalen Raum-Zeit muß nichtlineare algebraische Gleichungen für $\xi = \omega \cdot x - \nu t$ gelöst werden. Da die Herleitung dieser Gleichungen eine sehr wesentlichen Vergrößerung dieser Rahmen zur Folge haben wird, wird hier darauf verzichtet, siehe §5.4.3 für einige Kommentare.

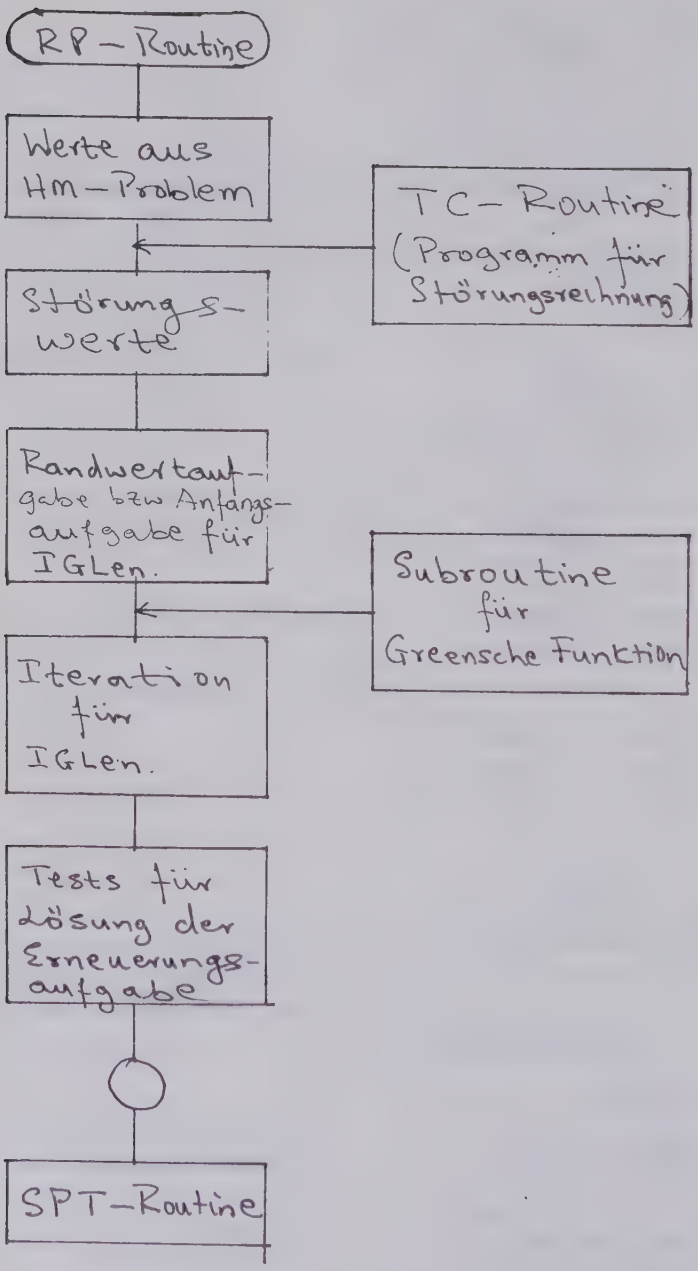
Zusammengefasst haben wir:

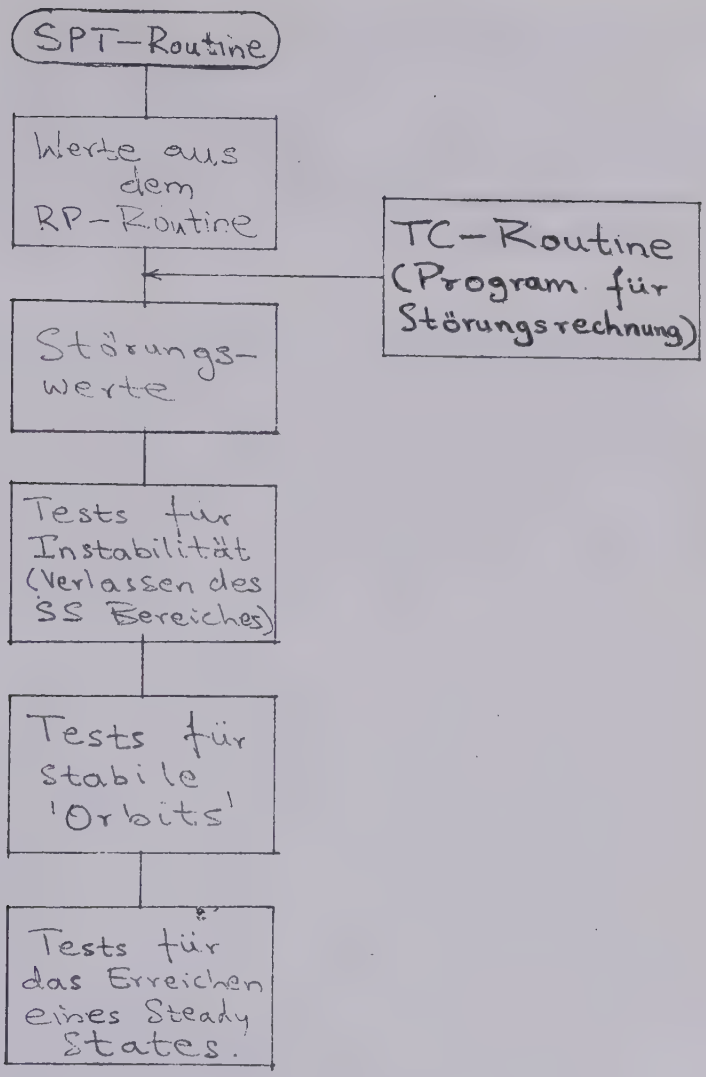


Wie die Skizzen auf Seite 252 bis 255 zeigen werden, kommt es im wesentlichen auf das HMP-Routine an. In der jetztigen Fassung sind Verzweigungen von RMP- zu RP- und SPT-Routines nicht eingebaut; dies ist möglich für gezielte Suche, allerdings muß der Parameterraum durch weitere Nebenbedingungen zerlegt werden. Diese Nebenbedingungen sind allerdings nur mittels weitere theoretische Ansätze zu erreichen, siehe Kommentare in §5.4.1.


HMP-Routine
TC-Routine (Transport Coefficient Routine)
Eingabewerte (für Steady States
Subroutine für Würzel von Polynomen
Variations-rechnung (§ 5.3.2
klassifierung von $\mu \in \mathbb{R}^m$
Subroutine für Matrizenmuti-plikation
Berechnung von $\exp A(\mu)\psi^0$
Störungsrech-nung
Test für Periodizität
EISPACK-Subroutine
Eigenwert-probleme
Sätze 4.2.21 u. 4.2.22
Iterationslösung HM-Problem
RP-Routine


TC-Routine
Funktionen für D(ρ), σ(ε) usw (§5.2.2)
1. Mal ?
JA
ANFANGSWERTE: SEELIGSCHE INERTE (1) DICHTE (2) PERMEATION ALS RICHTUNGSKOEFF. (KAP. 2)
NEIN
Wahl von nächsten ρ, D(ρ) usw.
Wahl von elliptischem Gebiet für Gitterpunkte
Iteration nichtlinearer Funktionen
MONTE CARLO EXPERIMENTE
PARAMETER IN FUNKTIONEN FÜR D(ρ) U.S.W STABIL ?
NEIN
JA
Störungsrechnung für Transportkoeff.
$\frac{\partial^k D(\rho)}{\partial \rho^k}$ u.s.w $k = 0,1,2,3$ bestimmen.
Program über Richtungskomponenten von Transportkoeff. im mehrdimensionalen Transport.
D(ρ), σ(ε), ... in Richtungskomponenten


RP – Routine
Werte aus Hm – Problem
TC – Routine (Programm für Störungsrechnung)
Störungs-werte
Randwertaufgabe bzw Anfangsaufgabe für IGLen.
Subroutine für Greensche Funktion
Iteration für IGLen.
Tests für Lösung der Erneuerungsaufgabe
SPT – Routine


SPT-Routine
Werte aus dem RP-Routine
TC-Routine (Program für Störungsrechnung)
Störungs-werte
Tests für Instabilität (Verlassen des SS Bereiches)
Tests für stabile 'Orbits'
Tests für das Erreichen eines Steady States.

5.4 Interpretationen und Ausblicke

Zwar haben die in dieser Arbeit aufgezeichneten Entwicklungen zu hilfreichen Nebenbedingungen (vgl den Parametergleichungen in Kapitel 5) geführt, trotzdem stehen weitgehend vereinfachten Simulierungsmodellen (mit etwa weniger Rechenaufwand) eine Reihe von Fragen im Wege; diese Fragen sind sowohl modelltheoretischer Art als auch numerisch. Diese anschließenden Bemerkungen sind diesen Fragen gewidmet.

5.4.1 AUSBLICKE ZUR THEORETISCHEN GRUNDLAGE

Ein Beitrag zur Verkleinerung des Parameterraumes wäre eine Aufklärung der chemischen Grundlage der Gedächtnisvorgänge. In diesem Zusammenhang sind es vor allem die spezifischen chemischen Kinetiken der Informationsspeicherung in biologischen Systemen, die von Nutzen sind. Diesbezüglich scheint mir 'mechanistische Modelle' für die chemische Kinetik geeignete Approximationswege, vor allem als analytischer Einstiegsweg in eine quantitative molekulare Grundlage des Gedächtnisses (auf der Grundlage der Quantenchemie).

5.4.2 AUSBLICKE ZUR DIREKTEN LÖSUNGSMETHODE

In dieser Arbeit wurde der Lösungsansatz durch den Ansatz $\psi(\xi) \equiv \psi(\omega x - \nu t)$ vereinfacht, so daß die partiellen DGLen des betrachteten Prozesses zu gewöhnlichen DGLen reduziert wurden. Man kann auch direkte Lösungsmethode für die partiellen DGLen anwenden, z.B. Dartsellung als IGLen bzw. Integrodifferentialgleichungen mit Hilfe der Methode der Greenschen Funktionen. Die Hürden hier sind: a) der größe Parameterraum, und b) die daraus resultierende Probleme der Konstruktion einer geeigneten Greenschen Funktion bei so vielen offenen Parametern. Anderseits (für Modelle mit endlichen Relaxationsgeschwindigkeit) kann eine direkte Lösung mittels abstrakter DGLen in Funktionenräumen gesucht werden; dieser Lösungsweg bedarf die Konstruktionen von Gebilden, die stetige Halbgruppen (siehe Daleckii et al [F-5]) genannt werden. (Allerdings bietet er folgende indirekte Wege zu Parametergleichungen, 1) über den Zusammenhang zwischen den Eigenwertproblemen des partiellen Differentialoperators des betrachteten Systems und der Voraussetzung für Exitenz der stetigen Halbgruppen, 2) über die analytische Darstellung einer derartigen

stetigen Halbgruppen und deren Konvergenzbedingungen, und 3) über die Formulierung entsprechender Variationsaufgabe für die in einem Funktionenraum eingebetteten DGLen).
Für beide direkte Lösungsmethode ist der Rückgriff auf verallgemeinerte Funktionen (z.B. Delta-Funtionen) unerläßlich; die Folge wäre, daß der Rahmen dieser Arbeit hätte wesentlich erweitert werden mussen.

5.4.3 AUSBLICKE ZUR NUMERISCHEN SIMULIERUNG BIOCHEMISCHER EVOLUTIONSVORGÄNGE

Bei den Vereinfachungen, die in dieser Arbeit benutzt wurden, musste man auf zwei Gleichungstypen zurückgreifen. Simulierungsversuche sind daher durch die Konstruktion von zwei Klassen von Iterationen belastet (entsprechend den Gleichungstypen, IGLen und gewöhnlichen DGLen, Kapitel 5) belastet, und mit großer Wahrscheinlichkeit kann nicht erwartet werden, daß dies nicht ohne Einfluß auf Fehlergrößen der Iterationen sein wird. Dies ist der Preis für den Verzicht auf verallgemeinerte Funktionen hinsichtlich der notwendigen Randwertaufgaben. Für die Einschränkung auf einen Gleichungstyp, etwa gewöhnliche DGLen vom Sturm-Liouvillschen Typ, kann auf Integralgleichungen verzichtet werden, falls

a) die zugehörigen Randwertaugaben nach den Methoden von Babuska (siehe Babuska et al [N·32]) in Anfangswertaufgaben transformiert werden, oder
b) die Aufgabe in einen Funktionenraum gänzlich eingebettet wird.

Im 1. Fall besteht der Nachteil darin, daß die Methode nur für eine Dimension erprobt ist. Im letzteren Fall bekommt man zwar die sogenannten 'schwachen' Lösungen, aber dafür hat eine Methode, die unabhängig von Dimension anwendbar ist. (Verallgemeinerte Funktionen (z.B. Delta-Funktionen) sind berechenbar).
Der Rückgriff auf Menge der Deltafunktionen scheint für eine eingehende Simulierungs unumgänglich, vor allem für die nähere Charakterisierung der dynamischen Austauschen zwischen Kompartmenten bzw. Komponenten. (Austausche zwischen Kompartmeneten bzw Komponenten entsprechen der RWA, siehe Kapitel 3, §3.1).

Um die Äquivalenzklassen von Raumlagen der chemischen Spezies einer

geeigneten chemischen Kinetik (wie sie für den Vorschlag in Kap. 2 gesucht wird) ist es erforderlich, (nichtlineare) Gleichungen für $\xi = \omega \cdot x - \nu t$ zu erzeugen und zu lösen; ein Lösungsansatz für dieses Problem ist die Anwendung von meromorphen Funktionen (siehe §4.4).

Hat man keinerlei direkte Anfangswerte, wie sie durch den Seeligschen Universaloscillator (als 'Lumped Parameter'-Approximation) vorliegen, so ist die Anfangswertaufgabe für die Hopf-Malkinsche Routine schwerig. Hier hilft nur noch grundsätzliche neue Fragestellungen, z. B. in der Form von 'Inverse Parameter Extimation Method' „ das nicht ohne weiteres hier aufzugreifen ist (da stochastische Überlegungen, siehe §1.3.2, zu berücksichtigen sind).

5.4.4 VERGLEICHE UND INTERPRETATIONEN

Zwei Vergleiche bzw. Interpretationen schliessen diese Arbeit. Der 1. betrifft der Annahme von veränderlichen Diffusionskoeffizienten. Dies ist nicht absolut neu, wie in §2.2.2 durch die Literaturhinweise belegt wurden; Beispiele sind in verschiedenen Probleme der Kontinnumsmechnik insbesondere anzutreffen, wo unterschiedeliche Materiedichte Prozessabläufe massgeblich beeinflüssen. Neu allerdings sind die analytischen Konstruktionen für veränderlichen Diffusionskoeffiziente unter Berücksichtigung des (fast) konstanten Verhaltens an Stellen des Steady States. Ganz neu jedenfalls sind die Konstruktionen für die Relaxationskoeffizienten; (für Überlegungen bzgl der Dichteabhängigkeit von Relaxationsphänomenen wird auf Hirschfelder at al [N-26] verwiesen). Beide Koeffizienten sind wichtige Steuerungsparameter, da das Verhalten der Eigenwerte der abgeleiteten gewöhnlichen DGLen wesentlich von ihnen abhängen.

Wie bereits in Kapital 2 detaliert aufgezeichnet wurde, ist die Konstruktion, NEURONICS-I, die als einer der Ergebnisse dieser Arbeit in Kapitel 2 vorgeschlagen wurde, mit bestimmten elekronischen Schaltungen vergleichbar. Kombinationen davon wären auch für mehrdimensionale Informationsverarbeitung ('Multi-directional processing') geeignet; entsprechende elektronische Vergleiche sind speziellen Thyristorenanordnungen, siehe Gerlach [N-6]

NEURONICS-I, ergänzt durch die Lösung der molekulären Gedächtnisprobleme (§5.4.1 oben) sowie durch die Lösung der neurochemischen Probleme der synaptischen Informationsmodulierung, konnte sich als eine der alternativen Wege zum Fernziel Molekülarelektronik, insbesondere 'molekuläres Rechnen' (molecular computation - mathematische Rechenoperationen mit Hilfe digigalisierte molekulärer Kinetiken) anbieten, vgl Bionik und elektronische Prozesse in Hamman et al [N-8].

Anhang: Wichtige Mathematische Hilfsmittel

Wictige Begrifee, die in dieser Arbeit benutzt. aber drin nicht definiert worden sind, werden in den Abschnitten dieses Anhangs knapp erläutert; Einzelheiten sind den jeweiligen Literaturangaben zu entnehmen.

A1 DYNAMISCHE SYSTEME UND AUTOMATA: DEFINITIONEN UND WICHTIGE EIGENSCHAFTEN

DEFINITION A1-1: Das 3-Tupel $\Sigma : \triangleq (\pi, \mathbb{R}^n, \mathbb{R}_t)$ heisst ein dynamisches System, wenn die Abbildung

(A-1) $$\pi : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_t \longrightarrow \mathbb{R}^n, \quad \pi \triangleq \pi(x,t)$$

folgender Bedingingen genügt:

a) $\pi(x,t) = x^\circ \quad t_\circ \equiv$ Anfangszeit

b) $\pi(\pi(x,t_1),t_2) = \pi(x,t_1+t_2)$

c) $\pi(x,t)$ ist stetig in $x \in \mathbb{R}^n$ und in $t \in \mathbb{R}_t$.

(siehe z. B. Kalman et al [N-9] Nemytskii + Stepanov [F-22])

Beispiele von dynamische Systemen sind Prozesse, die durch gewöhnliche DGLen definiert sind: Es sei

(A-2) $$\begin{aligned} \dot{x} &= \Phi(x,\mu,u) \\ &= A(\mu)x + \Phi'(x,\mu,u) \end{aligned}$$

($\mu \in \mathbb{R}^{\bar{r}}$ - ein $\bar{r}$-dimensionaler Parameterraum $\bar{r} \geq 0$, $u \in \mathbb{R}^{\bar{m}}$ ein $\bar{m}$-dimensionaler Raum (zulässiger Steuerungsfunktionen), $x \in \mathbb{R}^{\bar{n}}$, und $A(\mu)$ ein $\bar{n} \times \bar{n}$ Matrix) eine gewöhnliche DGL (vgl. (4.64)); ihe Lösung ist die IGL

(A-3) $$\begin{aligned} x &= e^{A(\mu)[t-t_\circ]}x^\circ + \int_{t_\circ}^{t} e^{A(\mu)[t-\tau]}\Phi'(x,\mu,u)d\tau' \\ &= e^{A(\mu)t}\left[e^{-A(\mu)t_\circ}x^\circ + \int_{t_\circ}^{t} e^{-A(\mu)\tau'}\Phi'(x,\mu,u)d\tau'\right] \\ &= \exp[A(\mu)t]\,\tilde{x}^\circ \end{aligned}$$

wobei $x = x(t,\mu,u)$, $\tilde{x}^\circ = x(t;t_\circ,x^\circ,\mu,u)$ $\tilde{x}^\circ \in \mathbb{R}^n$

Für das weitere wird folgende Definition gebraucht:

DEFINITION A1-2: Ein dynamisches System von Typ (A-2) mit einer Lösungsform von Typ (A-3) heisst DISSIPATIVE, falls

(A-4) $$X(t_1)^T X(t_1) > X(t_2)^T X(t_2)$$

für alle $t_1 < t_2$, $t_1, t_2 \in \mathbb{R}_t$, wobei $X(t)^T$ der transponierte Vektor ist.

(Siehe Willems [F-26]).

Einige Eigenschafte dynamischer Systeme:

Es lässt sich leicht nachprüfen, daß Definition A1-2 folgendes zur Folge hat:

SATZ A1-4: Für ein dynamisches System gilt stets

(A-5) $$\|\pi(X,t_1)\| > \|\pi(X,t_2)\|$$

für alle $t_1 < t_2$, $t_1, t_2 \in \mathbb{R}_t$, wobei mit $\|\cdot\|$ die Euklidische Norm auf $\mathbb{R}^n$ gemeint ist.

Was den Inhalt dieser Arbeit anbelangt (siehe insbesondere Kapitel 3 und 4), so ist folgender Typ dynamischer Systeme von besonderem Interesse:

DEFINITION A1-5: Ein dynamisches System heisst 'konservativ' falls es einen Interval $[t, t+\tau^*)$ gibt, so daß

(A-6) $$\|\pi(X,t)\| = \pi(X,t+\tau^*)$$

für alle $t, t+\tau^* \in \mathbb{R}_t$

In dieser Arbeit wurde stets Ebene-Wellen-Lösungen der Form $\psi(\xi) = \psi(\omega \cdot x - \nu t)$ gesucht; dadurch ergaben sich immer dynamische Systeme von Typ (A-2) in dem allerdings $t \in \mathbb{R}_t$ durch $\xi \in [0,1] \subset \mathbb{R}_\xi$ ersetzt wurde. Bezeichne die durch den Ebene-Wellen-Einsatz gewonnenen dynamischen Systeme als abgeleiteten dynamischen Systeme; dann gelten:

DEFINITION A1-6: Ein abgeleitetes dynamisches System heisst
a) DISPERSIV, falls es bezüglich $\xi \in \mathbb{R}_\xi$ dissipative ist, und
b) NICHT-DISPERSIV, falls es bezüglich $\xi \in \mathbb{R}_\xi$ konservativ ist.

Leicht nachprüfbar ist die Tatsache, daß die Identität (A-6) die Existenz von periodischen Lösungen voraussetzt. Somit gilt: Ebene-Wellen, wie in dieser Arbeit gesucht, sind nur möglich für nicht-

dispersive Systeme.

Das durch (A-2) bzw. (A-3) definierte System ist genauer gesagt ein gesteuertes dynamisches System: $\Sigma_c : (\pi_c, \mathbb{R}^{\bar{n}}, \mathbb{R}^{\bar{m}}, \mathbb{R}_t)$ mit $\pi_c : \mathbb{R}^{\bar{n}} \times \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}^{\bar{m}} \longrightarrow \mathbb{R}^{\bar{n}}$, $\pi_c = \pi(x, t, u)$ π_c genügt der Forderungen in Definition A1-1 und ist auch noch in $u \in \mathbb{R}^{\bar{m}}$ stetig; aus (A-3) ergibt sich, $\pi_c = \pi(x, t, u)$ ist $= \exp[A(u)t]\, \check{x}^{\circ}$, wobei $\check{x}^{\circ} \equiv \check{x}(t; t^{\circ}, x^{\circ}, u, u) \in \mathbb{R}^{\bar{n}}$ (vgl. Kalman et al [N-9]).

Automata:

In folgenden Paragraphen wird der Begriff 'Automaton' (Automata im Plural) erläutert, sowie dessen Beziehung zu dynamische Systemen, die in Kapitel 3 und 4 vorausgesetzt wurde.

DEFINITION A1-7: Das 5-Tupel $\Sigma_a : (\lambda_a, \sigma_a, \mathcal{I}, \mathcal{O}, \mathcal{S})$ mit den beigeordneten Abbildungen

$$\lambda_a : \mathcal{I} \times \mathcal{S} \longrightarrow \mathcal{S} \qquad \text{(A-7)}$$

$$\sigma_a : \mathcal{S} \longrightarrow \mathcal{O}$$

wird ein AUTOMATON genannt.

SPEZIELLE AUTOMATA:

1) Autonomes Automaton: Dafür gilt: $\Sigma_{aa} : (\lambda_{aa}, \sigma_{aa}, \mathcal{S})$
$\lambda_{aa} : \mathcal{S} \longrightarrow \mathcal{S}$ & $\sigma_{aa} = \sigma_a$

2) Input-Model: Dies is das beschränktes Automaton: $\Sigma_{ia} : (\lambda_{ia}, \mathcal{I}, \mathcal{S})$
$\lambda_{ia} : \mathcal{I} \times \mathcal{S} \longrightarrow \mathcal{S}$

3) Output-Model: Dies ist das beschränktes Automaton: $\Sigma_{oa} : (\sigma_{oa}, \mathcal{O}, \mathcal{S})$
$\sigma_{oa} : \mathcal{S} \longrightarrow \mathcal{O}$

4) Gesteuertes dynamisches System als beschränktes Automaton: Durch die Zuordnungen $\pi_c = \lambda_{ia}$, $\mathcal{I} = \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}^{\bar{m}}$ & $\mathcal{S} \equiv \mathbb{R}^{\bar{n}}$ ist ein gesteuertes dynamisches System dem Input-Model äquivalent. Eine ähnliche Äquivalenz zu Output-Model durch die Zuordnungen $(\pi_c)^{-1} = \sigma_{oa}$, $\mathcal{S} \equiv \mathbb{R}^{n}$, $\mathcal{O} \subset (\mathbb{R}_t \times \mathbb{R}^{m})$ ist nur dann zulässig, wenn π_c eine eindeutig invertierbare Abbildung ist.

5) Aus 4) oben folgt eindeutig: Ein dynamisches System ist ein Input-Model, in dem Zeit die einzige Menge der Eingaben bildet.

Für weitere feinerer Differenzierung der Beziehungen zwischen

Automata und dynamischen Systemen wird auf Kalman ate al [N-9] verwiesen, vor allem auf die dortigen Verweise auf die Arbeiten von Arbib.

Als nächstes ist folgendes spezielle Definition für Evolutionsautomaton notwendig; hierzu: Es sei $\mathcal{S}_{SS} \subset \mathcal{S}$ die Menge von geeigneten kleinen Umgebungen der Stellen von Steady States.

DEFINITION A1-8: Das 4-Tupel $\Sigma_{ea} : (\lambda_{ea}, \sigma_{ea}, \mathcal{S}_{ea}, \mathcal{S}_{SS})$ wird ein (spezielles) Evolutionsautomaton genannt, wenn folgendes gilt:

(A-8)
$$\lambda_{ea} : \mathcal{S}_{ea} \times \mathcal{S}_{SS} \longrightarrow \mathcal{S}_{SS}$$
$$\sigma_{ea} : \mathcal{S}_{SS} \longrightarrow \mathcal{S}_{SS}$$

Die 1. Abbildung in (A-8) bezieht sich auf die Destabilisierung eines stationären Zustandes (siehe Kapitel 5), and die 2. die Ausnutzung dieser Destabilisierung für Überführung in einen anderen stationären Zustand.
Der Durchgang von einen stationären Zustand zum anderen macht das Konzept von Entwicklungssystem notwendig: Es sei $\mathcal{S}_{iS}$ eine Zustandsmenge, $\mathcal{S}_{iS} \cap \mathcal{S}_{SS} = \phi$, dann

DEFINITION A1-9: Das 7-Tupel $\Sigma_{es} : (\lambda_{es}, \sigma_{es}, \tilde{\lambda}, \mathcal{J}, \mathcal{O}, \mathcal{S}_{iS}, \mathcal{S})$ dem die Abbildungen

(A-9)
$$\lambda_{es} : \mathcal{S}_{es} \times \mathcal{S}_{SS} \longrightarrow \mathcal{S}_{iS}, \quad \mathcal{S}_{ea} \subset \mathcal{S}_{es} \subset \mathcal{J}$$
$$\tilde{\lambda} : \mathcal{S}_{iS} \longrightarrow \mathcal{S}_{SS}$$
$$\sigma_{es} : \mathcal{S}_{SS} \longrightarrow \mathcal{O}$$

beigeordnet werden, wird ein Entwicklungssystem genannt.

Zwei wichtige Eigeschaften von Automata sind a) ihre Zerlegbarkeit in kleine Einheiten (Untermengen), und b) ihre innere Transformierbarkeit (vor allem zwischen Zerlegungseinheiten), siehe Kalman et al [N-9]. Den kombinierten Anwendungen dieser Tatsachen liegen die Definitionen A1-8 und A1-9 zugrunde (siehe vor allem die Einführung der Zwischenzustände IS(1) und IS(-1) in Kapitel 4 usw).

A2 DIE STURMSCHE THEORIE FOR GEWÖHNLICHE DGLen

Es sei (a, b) ein Interval. Das System

$$L(y) \equiv \frac{d}{dx}\left(R(x)\frac{dy}{dx}\right) - S(x)y = \bar{\bar{F}}\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) \tag{A-10}$$

mit der AWA

$$y(x_0) = y_0 \,,\; y'(x_0) = \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_0} = \tilde{y}_0 \,,\; x_0 \in (a,b) \tag{A-11}$$

und der RWA

$$\begin{aligned} \alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) &= f_1 \quad (\equiv B_1 y) \\ \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) &= f_2 \quad (\equiv B_2 y) \end{aligned} \tag{A-12}$$

wird die Sturmsch-Liouvillsche Aufgabe für gewöhnliche DGLen genannt.

Die Sturmscche Theorie des Systems (A-10) mit der AWA besteht aus folgenden Ergebnissen:

a) Jede Lösung des Systems (A-10) mit unendlicher Anzahl von Nullstellen im Interval (a, b) ist identisch Null.

b) (Trennsatz): Für jede Lösung des System (A-10), die im Interval (a, b) oszillatorisch ist, gibt es eine Zerlegung des Intervals (a, b) der Art, daß die Lösung im Teilinterval $(a_{i'}, b_{i'})$ nicht oszillatorisch ist.

c) (Oszillationssatz): Falls die Lösung des Systems (A-10) im Interval (a, b) oszilliert, so ist die Oszillation um so rascher je mehr die Funktionen $R(x)$ und $S(x)$ abnehmen.

Setze $R(x)$ = const., während $S(x)$ abnehmen darf. Wähle zwei Werte $\tilde{S}_1, \tilde{S}_2$, $\tilde{S}_1 \geq \tilde{S}_2$ und $\tilde{S}_1 \not\equiv \tilde{S}_2$ über ganz (a, b). Ist $Y_1(x)$ die Lösung des Systems (A-10) mit $S = \tilde{S}_1$, und $Y_2(x)$ die entsprechende Lösung mit $S = \tilde{S}_2$ so gelten

$$\frac{d}{dx}\left(R(x)\frac{dy}{dx}\right) - \tilde{S}_1 y = 0 \tag{A-13}$$

und

$$\frac{d}{dx}\left(R(x)\frac{dy}{dx}\right) - \tilde{S}_2 y = 0 \tag{A-14}$$

Durch Multiplikation der Systeme (A-13) und (A-14) mit $Y_1(x)$ bzw $Y_2(x)$ ergibt sich

$$R(Y_1'Y_2 - Y_2'Y_1)\Big|_{x_1}^{x_2} = \int_{x_1}^{x_2} (\tilde{S}_1 - \tilde{S}_2) Y_1 Y_2 \, dx \; ; \tag{A-15}$$

(dies ist ein Speziellfall der Greenschen Funktion, siehe z.B Ince [F-10] , Coddington et al [F-4]).

Die allgemeine Bedingung für die Existenz von oszillatorischen Lösungen ergibt sich wie folgt:
Es seien R^{**}, S^{**}, und R^*, S^* die oberen bzw unteren Schränken der Funktionen $R(x), S(x)$ über das ganze Interval (a, b) d.h.

$$\begin{aligned} R(x) &\geqslant R^{**} \geqslant R^* > 0 \\ S(x) &\geqslant S^{**} \geqslant S^* > 0. \end{aligned} \tag{A-16}$$

Dann sind

$$\begin{aligned} \frac{d^2y}{dx^2} - \frac{S^*}{R^*} y &= 0 \, , \\ \frac{d^2y}{dx^2} - \frac{S^{**}}{R^{**}} y &= 0. \end{aligned} \tag{A-17}$$

Minorante bzw. Majorante des gegebegen Systems (A-10). Daraus ergeben sich folgende Bedingungen für oszillatorische Lösungen:

$$\begin{aligned} -\frac{S^*}{R^*} &< \pi^2 (b-a)^{-2} \\ -\frac{S^{**}}{R^{**}} &\geqslant \pi^2 (b-a)^{-2} \end{aligned} \tag{A-18}$$

(siehe Ince [F-10] Kap. 10).

Die weitere Entwicklungen der Sturmschen Theorie sind die Vergleichsätze über die Trennung der Nullstellen von zwei Lösungen, die zwei verschiedenen $R_1(x)$, $R_2(x)$ und $S_1(x)$, $S_2(x)$ entsprechen, siehe Coddington et al [F-4] . In dieser weietern Entwicklung der Sturmschen Theorie spielt die spezielle RWA, die durch

(A-19) $$\alpha_1 = \cos\theta,\ \alpha_2 = -R(a)\sin\theta,\ 0 \le \theta \le 2\pi$$
$$= \beta_1 \qquad \beta_2 = -R(b)\sin\theta$$

gegeben ist, eine wichtige Rolle, siehe Coddignton et al [F-4] für deren Ableitung. Durch sie sind die Probleme der periodischen RWA leichter zu betrachten (vgl. Kap. 3 dieser Arbeit); über sie führen Vergleiche an entsprechenden Rändern zu nützlichen Nebenbedingungen.

A3 DIE TRANSFORMATION VON DGLen in IGLen

Es wird erneut das System (A-10) mit der AWA (A-11) und RWA (A-12) betrachtet.
Zuerst wird das System

(A-20) $$L(y) \equiv \frac{d}{dx}(R(x)y') - S(x)y = 0 \quad (\overline{\overline{F}} \equiv 0)$$

betrachtet; es ist dem System

(A-21) $$\overline{Y}' = \overline{M}\,\overline{Y} \qquad \overline{Y}' = \frac{d\overline{Y}}{dx}$$

äquivalent, wobei

(A-22) $$\overline{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{S(x)}{R(x)} & -\frac{R'(x)}{R(x)} \end{pmatrix}, \quad \overline{Y} = \begin{pmatrix} Y_1' \\ Y_2 \end{pmatrix}, \quad Y_1' = y$$

Sind ϕ_1, ϕ_2 zwei Lösungen von (A-20) bzw. (A-21) so ist die lineare Kombination $\eta_1\phi_1 + \eta_2\phi_2$ auch eine Lösung. Bekanntlich ist dann

(A-23) $$\tilde{\Phi}(\phi_1,\phi_2) = \begin{pmatrix} \phi_1 & , \phi_2 \\ \phi_1' & , \phi_2' \end{pmatrix} \quad \phi_{i'}' = \frac{d\phi_{i'}}{dx} \quad i' = 1, 2$$

auch eine Lösung des Systems (A-21).

Det $\tilde{\Phi}$ wird dei Wronskiansche Determinante für das System (A-20) gennant; als Lösung des System (A-21) genügt sie der

Gleichung

(A-24) $$W(\phi_1,\phi_2)(x) = W(\phi_1,\phi_2)(x_0)\int_{x_0}^{x} -\left(\frac{\frac{dR(x)}{dx}}{R(x)}\right)dx$$

$$W(\phi_1,\phi_2)(x) = \det \Phi(x)$$

Zurück zum System (A-10): Es wird mit Hilfe der Variation von Parametern (in der linearen Kombination $\eta_1\phi_1 + \eta_2\phi_2$) und der Konstruktion

$$y = \int_a^b K(x,x')F(x')\,dx' \qquad \phi = (\phi_1,\phi_2)$$

(A-25)
$$K(x,x') = \frac{1}{p_0(x')}\left[W(\phi_1,\phi_2)\right]^{-1}\begin{vmatrix}\phi_1(x'), & \phi_2(x')\\ \phi_1(x), & \phi_2(x)\end{vmatrix}$$

gelöst, wobei ϕ die Lösung des Systems (A-20) ist.

Für die RWA (A-12) betrachten wir zuerst die homogene RWA

(A-26) $$B_{i'}\,y = 0 \qquad i' = 1,2\,; \quad (f_{i'} = 0)$$

im Zusammenhang mit dem System (A-10) und der AWA (A-11). Dann ist

(A-27) $$\tilde{u}(x) = \int_a^b G(x,x')\overline{\overline{F}}(x',y,y')\,dx'$$

die Lösung des System (A-10), die der RWA (A-26) genügt; dabei bedeuten:

(A-28) $$G(x,x') = \tilde{K}(x,x') + \eta_1\phi_1 + \eta_2\phi_2$$

$$B_{i'}G(x,x') = B_{i'}\tilde{K}(x,x') + \eta_1 B_{i'}\phi_1 + \eta_2 B_{i'}\phi_2 = 0$$

(A-29) d.h.
$$\sum_{i''=1}^{2}\eta_{i''}B_{i'}\phi_{i''} = -B_{i'}\tilde{K} \quad , \; a \le x' \le b$$

Ohne Betrachtung der RWA ist

(A-30) $$\tilde{\tilde{u}}(x) = \int_a^b K(x,x')\overline{\overline{F}}(x',y,y')\,dx'$$

die Lösung vom System (für sich allein betrachtet). Für die Erfüllung der RWA (A-26) setzt man (A-28) ein; für Einzelheiten wird auf Coddington et al [F-4], Kapitel 3 und 7 und Ince [F-10] verwiesen.

Für das System (A-10) mit der AWA (A-11) und der RWA (A-12) lautet die vollständige Lösung dann:

(A-31) $$y(x) = \int G(x,x')\bar{\bar{F}}(x',y,y')dx' + f^*(x)$$

wobei

$$f^*(x) = \sum_{i'=1}^{2} f_{i'}\varphi_{i'}(x)$$

(A-32) $\varphi_j(x)$ Lösung der RWA:

$$L(y) = 0 \qquad B_j y = 1$$

$$B_{i''}y = 0 \qquad i'' \neq j\,,\ i'',j = 1,2$$

A4 DAS PRINZIP DER ERZEUGENDEN FUNKTIONEN

Die Methode der erzeugenden Funktionen spielt eine indirekte Rolle bei der Wahl der Tchebycheffschen Polynome für die in dieser Arbeit benutzen polynomischen Substitutionen.

Eine erzeugende Funktion ist eine Funktion, mit deren Hilfe eine andere Funktion bestimmt wird (eine inverse Methode zu Bestimmung einer gewählten Funktion). Für die Tchebycheffschen Polynomen führt der Einsatz

(A-33) $$\sum_{r=0}^{\infty} u^r e^{ir\theta} = \sum (ue^{i\theta})^r \qquad |u| < 1$$

durch die Betrachtung von reellen Teilen

(A-34) $$\sum_{r=0}^{\infty} u^r \cos r\theta = \frac{1 - u\cos\theta}{1 + u^2 - 2u\cos\theta}$$

zu der Formel

(A-35) $$\tilde{G}(u,\xi) = \frac{1-u\xi}{1+u^2-2u\xi} = \sum_{r=0}^{\infty} T_r(\xi)u^r$$

$\tilde{G}(u,\xi)$ wird die erzeugende Funktion der Tchebycheffschen Polynome genannt, da sich die $T_r(\xi)$ durch Vergleiche der entsprechenden Potenzen von u^r bestimmen lassen, nachdem $(1-u\xi)(1+u^2-2u\xi)^{-1}$ in Reihen entwickelt worden ist, siehe Rivlin [5-23].

Die rechte Seite von der Formel (A-35) ist vergleichbar mit dem Einsatz (5.28), Kapitel 5, wobei $\alpha_q = \varphi(u^r)$ anzunehmen ist. Für periodische Lösung bzgl ξ (Voraussetzung für Ebene-Wellen Lösungen), mit Periode ξ^* ergibt sich folgende inverse Augabe:

$$\frac{1-u\xi}{1+u^2-2u\xi} = \sum u^r T_r(\xi) = \sum u^r T_r(\xi+\xi^*) = \frac{1-u(\xi+\xi^*)}{1+u^2-2u(\xi+\xi^2)} \tag{A-36}$$

Durch die Reihenentwicklung für die rationale Ausdrücke in (A-36) obe (siehe Rivlin [5-23]) ergeben sich Polynome für die Periode ξ^*, wie bereits in Kapitel 5 festgestellt wurde. Dies ist leicht aus der Beziehung

$$\xi + \xi^* = \cos(\theta+\theta^*) \quad , \quad \xi = \cos\theta$$

$$\xi^* = \cos(\theta+\theta^*) - \cos\theta = \{\cos\theta^* - 1\}\cos\theta - \sin\theta\sin\theta^* \tag{A-37}$$

abzulesen. Die inverse Aufgabe bzgl. einer periodischen Lösung lautet: man bestimme ξ^* für die die Identitäten in (A-36) bzw. (A-37) erfüllt sind.

Zum Schluß soll bemerkt werden: Ein Fourierscher Einsatz der Form

$$\sum \beta_k e^{ik\xi} = \sum \beta_k e^{ik(\omega\cdot x - \nu t)} \tag{A-38}$$

für Lösungen ist indirekt ein Einsatz bezüglich der Tchebycheffschen Polynome.

L I T E R A T U R N A C H W E I S

(nach den Zentralthemen
der Arbeit geordnet)

LITERATURVERZEICHNIS

A. Allgemeiner Teil

A-1 Abelson, P.H. et al: Electronics - The Continuing Revolution, The AAAA, Washington 1978

A-2 Abelson, P.H. et al: Materials - Renewable and Nonrenewable Resources, The AAAA, Washington 1977

A-3 Aroeste, H: Toward an Analytic Theory of Chemical Reactions Adv. Chem. Phys. 6 (1954) 1 - 83

A-4 Borell, P.: Photochemistry: A Primer, Edward Arnold 1973

A-5 Calvert, J.G et al: Photochemistry, Wiley 1966

A-6 Cardona, M et al: Photoemissions in Solids I (Chapter 1) Springer Verlag 1978

A-7 Chałazonitis, N.C.: Light Energy Concersions in Neuronal Membranes, Photochem. Photobiol. 3 (1964) 539 -559

A-8 Chynowett, A.G: Electronic Materials: Functional Substitutions, in [A-2] Seite 123 - 130

A-9 Classen, R.S.: Materials for Advanced Energy Technology in [A-2] Seite 146 - 151

A-10 Cormier et al: Chemiluminescence and Bioluminescence, Plenum Press 1973

A-11 Denbigh K.G; Hicks, M. & Page, F.M.: The Kinetics of Open Reaction Systems, Trans. Faraday Soc. 44 (1948) 479 - 494

A-12 Denbigh, K.G. & Turner ,J.C.R.: Einführung in die Chemische Reaktionskinetik, Verlag Chemie 1973

A-13 Devreese, J.T. et al: Highly Conducting 1-dimensional Solids, Plenum Press

A-14 de Groote S.R. & Mazur, P.B.: Anwendung der Thermodynamik Irreversibler Prozesse, BI Mannheim 1974

A-15 Emery, V.J.: Theory of 1-dimensional Electron Gas, in [A-13] pp 247 - 303

A-16 Encyclopaedia Brititanica: Macropaedia Bd. 14, Seite 291 - 296 (Photochemical Reactions)

A-17 Giordmaine, J.A.: Solid-State Electronics - Scientific Basis for future advances, in [A-1] Seite 202 - 207

A-18 Golowanow, I.B.: Elementare Einführung in die Quantenchemie und Quantenbiochemie, Bertelsman Univerlag 1974

A-19 Grivet, P.: Sixty Years of Electronics, Adv. Electr. & Electr. Phys. 50 (1980) 89 - 174

A-20 Haken, H.: Synergetics - Cooperarive Phenomena in Multicomponent Systems, Teubner Verlag, Stuttgart 1973

A-21 Haken, H: Cooperative Effects - Progress in Synergetics North Holland Publ. Co., 1974

A-22 Haken, H: Synergetics - An Introduction, Springer 1977

A-23 Haken, H: Quantenfeldtheorie, Tuebner, Stuttgart 1973

A-24 Hameka, H: Advanced Quantum Chemistry, Addison-Wesley 1965

A-25 Hammes, G.H: Principles of Chemical Kinetics, Acad Press 1978

A-26 Hart, J: Solid State Electronic Behavior of Biological Systems, Insulation Circuits 21 (6/1975) 27 - 29

A-27 Hartman, H: Chemische Elementarprozesse, Springer 1968

A-28 Herriot, P: Attributes of Memory, Methuen, London 1974

A-29 Hesse, H: Halbleiter I, BI Mannheim 1974

A-30 Hillig, W.B: New Materials and Composites, in [A-2] Seite 131 - 137

A-31 Hodgkin, A.L. et al: A Quantitative Description of Membrane Current and Its Application to Conduction and Excitation in Nerves, J. Physiol. (London) 117 (1952e) 500 - 544

A-32 Karfunkel, H: Zur Theorie der Anregbarkeit und Ausbreitung von Erregungswellen in chemischen Reaktionssystemen, Dissertation, Universität Tübingen 1975

A-33 Katz, B: Nerv, Muskel und Synapse, George Thieme 1971

A-34 Kauzman W.: Quantum Chemistry - An Introduction, 1957

A-35 Kazanchian A. et al: Nonlinear Equations for Simple Chemical Reactions with Physical Interpretations Z. Physik B38 (1980) 181 - 184

A-36 Kopkinson, A.C.: A Theoretical Study of the Heats of Formation of some small Molecules using Non-Empirical Wave Functions, Theor. Chim Acta (Berl.) 23 (1972) 369 -377

A-37 Lee, E.B. & Markus, L.: Foundations of Optimal Control Theory, Interscience -Wiley, New York 1962

A-38 Ley et al: Photoemissions in Semiconductors, Chapter 2 in Photoemissions in Solids II (Ley und Cardona eds.) 1979

A-39 Mbaeyi, P.N.O.: δ-Null Steuerbarkeit unendlich dimensionaler Systeme, Österreichisches Math. Kongress, Salzburg 1977

A-40 Mbaeyi, P.N.O.: Time Optimal Control of Infinite Dimensional Systems, To appear Proc. 5th Euorp. Meeting Cybernetics & Systems Research, Wien 1980

A-41 Mbaeyi, P.N.O.: Information Capacity of Neural Networks I - Single Neurons and Basic Mathematical Model To appear Proc. 5th Europ. Meeting Cybernetics & Systems Research, Wien 1980

A-42 Mbaeyi, P. N. O.: Information Capacity of Neural Networks II - One Dimensional Neural Networks, To appear in Proc. Workshop Math. & Computer Methodologies in Biology and Medicine, University of Salerno, Salerno, Italy, April 1980

A-43 Mbaeyi, P. N. O.: The Many Faces of Memories - Alternative Framework for Development of Memory Concepts Submitted for 6th European Meeting Cybernetics and Systems Research, Wien 1982

A-44 Mbaeyi, P. N. O.: Towards a 'Rational' Mechanics of Epilepsy, sublitted to 6th European Meeting Cybernetics and Systems Research, Wien 1982

A-45 Mbaeyi, P. N. O.: Model Theoretical Pre-conditions for Large-scale Chemical Information Coding and Retreaval (To be submiited to Proc. IEEE in answer to an article of Keyes appearing in same journal).

A-46 Meinhardt, H & Gierer, A.: Applications of a Theory of Biological Pattern Formation based on Lateral Inhinbition J. Cell Sci. 15 (1974) 321 - 346

A-47 Metz, W. D.: New Materials - A Growing List of Non-metallic Metals, in [A-2], Seite 143 - 145

A-48 Noback, C. R. & Demarest, R. J.: The Human Nervous System - Basic Principles of Neurobiology, McGraw-Hill 1975

A-49 Offner, F.F.: Nernst-Planck-Poisson Diffusion - Numerical Solution of the Boundary Problem, J. Theor. Biol. 31 (1971)

A-50 Perkalski, A. et al (Ed): Modern Trends in Condensed Matter, Lecture Notes in Physics Vol. 115, Springer 1980

A-51 Persico, F.: Interaction between strong Radiation Fields and 2-level atoms - A Canonical Transformation Approach in [A-50], Seite 571 - 597

A-52 Pismen, L. M.: Electric Currents in Organic Crystals Scientific American 216 (1967) Seite 87 ff

A-53 Porter, G.: Picosecond Chemical Kinetics, in [E-69] 288

A-54 Panchenkov, G.M. & Lebedev, V. P.: Chemical Kinetics and Catalysis, MIR Publishers, Moscow 1976

A-55 Roessler, O.: Self-Reproduction and Serial Message Transfer: Two Related Problems, Bull Math. Biophy. 34 (1972) 343

A-56 Roessler, O.: Grundschaltungen von flüßigen Automaten und Relaxationssystemen, Z. Naturforschung 276 (1972) 333 - 343

A-57 Roessler, O.: Chemical Automata and Reaction-Diffusions Kinetics

A-58 Scott, A. C.: Neurophysics, Academic Press 1977

A-59 Schiff, L.I.: Quantum Mechanics, McGraw-Hill 1955

A-60 Seelig, F. F.: Quantentheorie der Moleküle, 1974

A-61 Seelig, F. F.: Offene Reaktionssysteme mit Hystere als chemische Informationselemente, Berichte der Bunsen-Gesellschaft 80 (1976) 1126 - 1131

A-62 Seelig, F. F. et al: Hysteresis without Autocatalysis: Simple Enzyme Systems as Possible Binary Memory Elements

A-63 Seib, D. H. & Aukerman, L. W.: Photodetectors for the 0.1 1.0 µm Spectral Region, Adv. Electronics & Electr. Physics 34 (1973) Seite 95 - 221

A-64 Sommer, A. H.: Photoemissive Materials, Wiley 1968

A-65 Spinks, J. W. T. & Woods, R. J.: Introduction to Radiation Chemistry, Wiley 1976

A-66 Thomas D et al: Experimental Evidence for a Kinetic electrochemical memory in Enzyme Membranes, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) 74 (Nr. 12) 1977 5314 - 5317

A-67 Turing, A. M.: The Chemical Theory of Morphogenesis, Phil. Trans. Roy. Soc. B 237 (1952) 5 - 72

A-68 Willardson R. K. & Beer, Albert C.: Semiconductors and Metals, Vol. 4 , Academic Press

B. Über (hierarchische) Modellierung kooperativer Phänomene unter Berücksichtigung endlicher Mengen

B-1 Athans, M. A. & Sandell, N.: Stability of Interconnected Systems

B-2 Araki, S.: Applications of M-Matrices to the Stability Problems of Composite Dynamical Systems, J. Math. Analysis Applications 52 (1975) 309 - 321

B-3 Baer, J. L.: A Survey of Some Theoretical Aspects of Multiprocessing, Computing Surveys 5,1 (1973) 31 - 80

B-4 Brinch, H. P.: Distributed Processes - A Concurrent Programming Concept, CACM 21 (Nov. 1978) 934 - 941

B-5 Cobelli, C. & Romain-Jacur, G.: Controllability, Observability and Structured Identifiability of Multi-Input and Multi-Output Biological Compartmental Systems, IEEE Trans Biomed. Eng. vol VBE - 23 , No. 2 (1976) 93 - 100

B-6 Coffman, C. V. & Fix, G. J.: Constructive Approaches to Mathematical Models, Academic Press 1979

B-7 Enslow, P. H.: What is a 'Distributed' Data Processing

System, Computer 11 (Jan. 1978) 13 - 21

B-8 Furasow, V. D.: On Vector-Valued Liapunov Functions and Stabilizations of Interconnected Systems, J. Appl. Math. Mech. 39, no. 1 (1975) 51 - 57

B-9 Gardner, M. R. & Ashby, W. R.: Connectance of Large Dynamic (Cybernetic) Systems - Critical Values for Stability Nature, Vol. 228 (1970) 784

B-10 Giloi, W. K.: Rechnerarchitektur, Springer-Verlag 1981

B-11 Grateloup, G. & Richetin, M.: On the Partitioning Problem in the Synthesis of Multilevel Optimization Structures, in G. I. Marchuk (Ed.) - 'Optimization Techniques' - IFIP Tech. Conf. Novossibirski 1974, Springer 1975

B-12 Guttag, J.: Abstract Data Types and the Development of Data Structures, CACM 20 (June 1976) 396 - 404

B-13 Himmelblau, D. M.: Decomposition of Large-Scale Systems - II: Systems containing Nonlinear Elements Chem. Eng. Sci. 22 (1967) 883 - 895

B-14 Himmelblau, D. M.: Decomposition of Large-Scale Problems North-Holland Publishing Coy. 1973

B-15 Johnson, C.D.: State Over-Prescription and Uncontrollability of Dynamical Systems, Inter. J. Control 19 (1974) 225

B-16 Johnson, C. D.: Over-Modelling of Dynamics Systems

B-17 Karp, R. M. & Miller, R. E.: Properties of a Modell for Parallel Computations - Determinacy, Termination, Queuing SIAM J. Applied Math. 14 (1966) 1390 - 1411

B-18 Kevorkian, A. K. & Snoek, J.: Decompositions in Large Scale Systems - Theory and Applications of Structural Analysis in Partitioning, Disjointing and Constructing Hierarchial Models, in [B-14], Seite 467 - 489

B-19 Mbaeyi, P. N. O.: Mathematical Modelling in the Neural Sciences: Qualitative Systems Theoretical Approach, Afromatics 1 (1979) 87 - 121

B-20 Mbaeyi, P. N. O.: Determination of Ultrastructures in Diffusion Processes via Hierarchial Modelling Vortrag anläßlich der Inter. Conf. Numerical Methods in Thermal Problems, University College, Swansea, 1979

B-21 Mbaeyi, P. N. O.: The Teachables and Non-Teachables of Mathematical Modelling, Proc. 2nd Inter. Conf. Math. Modelling, vol. 2 699 - 708, Univ. Missouri-Rolla, USA

B-22 Mbaeyi, P. N. O.: When is Data Ensemble Sufficient for Reliability Predictions, Proc. 3rd National Reliability

Conference, Birmingham, April 1981

B-23 Mbaeyi, P. N. O.: Hierarchial Models versus Finite Elements Proc. Inter. Conf. Numerical Methods in Thermal Problems Venice, June 1981

B-24 Mbaeyi, P. N. O.: Some Practical Guides through the Labryniths of Mathematical Modelling, Vortrag, 3rd Inter. Conf. Mathematical Modelling, Los Angeles 1981

B-25 Mitsui, A. T.: A Phase Transition Model of Membrane Excitation - I: Cycle of Excitation, Collective Phenomena 1 (1974) 185 - 192

B-26 Nichloas, J.: Chemical Kinetics - A Modern Survey of Gas Reactions, Harper & Row Publ. 1976

B-27 Nilsson, Nils J.: Learning Machines - Foundations of Trainable Pattern Classifying Systems, McGraw-Hill 1965

B-28 Odell, G. M.: A New Mathematical Continuum Theory of Axoplasmic Transport, J. Theor. Biol. 60 (1976) 223 - 237

B-29 Pismen, L. M.: Multiscale Propagation Phenomena in Reaction-Diffusion Systems, J. Chem. Phys. 71 (1979) 462 - 473

B-30 Resch, G.: The Hierarchic Order of the Solid State: Part 1 - Fundamental Considerations, Z. Phys. Chemie (Neue Folge) Bd. 121 (1980) 211 - 235

B-31 Rice, S. A.: Internal Eneregy Transfer in Isolated Molecules - Ergodic and Nonergodic Behavior, in [E- 69] 2 - 42

B-32 Rosen, R.: On Interconnections between Dynamical Systems Math. Biosciences 27 (1975) 299 - 307

B-33 Singer, S. J. & Nicolson, G. L.: Fluid Mosaic Model of the Structure of Cell Membrane, Science 175 (1972) 720 - 731

B-34 Smith, I. W. M.: The Production of Excited Species in Simple Chemical Reactions, Adv. Chem. Phys. 28 (1976) 1 - 111

B-35 Stahl, W. R.: The Role of Models in Theoretical Biology Progress in Theor. Biology 1967 165 - 218

B-36 Stanley, G. M. & Mah, R. S. H.: Observability and Redudancy in Process Data Estimation, Chem. Eng. Sci. 36 (1981) 259-272

B-37 Toennies, J. P.: Chemische Elementarprozesse, Springer 1968

B-38 Thurber, K. J. & Wald, L. D.: Associative and Parallel Processors, Computing Surveys 7 (Dec. 1975) 215 - 255

B-39 Varmuza, K: Pattern Recognition in Chemistry, Springer 1980

B-40 Veress, G. E. et al: On the Solution of Large-Scale Problems by Decomposition, in [B-14], Seite 141 - 151

B-41 Wegner, P.: Programming Languages, Information Structures

and Machine Organization, McGraw-Hill 1971

B-42 Wiener, N.: Perspectives in Cybernetics
Prog. Brain Research vol. 17 (1965) 399 - 408

B-43 Wilson, E. L. & Nickell, R. E.: Application of Finite Element Method to Heat Conduction Analysis, Nuclear Eng. & Design 4 (1966) 276 - 286

B-44 Zienkiewicz, O. C.: The Finite Element Method - From Intuition to Generality, Appl. Mech. Rev. 23 (1970) 249 - 256

C. Über Schwellenzustände und deren Erhaltung in der Evolution und Darstellung durch Spezielle Wellenformen:

C-1 Bekefi, G. (Ed.): Principles of Laser Plasmas, Wiley 1976

C-2 Bowers, M. T. & Su, T.: Thermal Energy of Ion-Molecule Reactions, Adv. Electronics & Electr. Physics 34 (1973)

C-3 Chernavskii, D. S.: Dissipative Structures in Morphogenetic Models of Turing Type, J. Theor. Biol. 73 (1978) 585-607

C-4 Clark, D. T.: Non-Empirical LCAO-MO-SCF Calculations with Gaussian-type Functions on some Three Membered Ring Heterocycles: II - Energies and Population Analysis
Theor. Chim. Acta (Berlin) 15 (1969) 225 - 234

C-5 Copeland, A. R.: Axonal Transport I & II, Bull. Math. Biol. 38 (1976) 425 - 444

C-6 Delcroix, J. L. et al: Metastable Atoms and Molecules in Ionized Gases in [C-1] Seite 159 - 233

C-7 Denbigh et al ⟹ A-11

C-8 Dorne, J.: The Effects of Ionic Migration on Oscillations and Pattern Formation in Chemical Systems, J. Theor. Biol. 43 (1974) 375 - 380.

C-9 Feistel, R. & Ebeling, W.: Deterministic and Stochastic Theory of sustained Oscillations in Autocatalytic Reaction Systems, Physica 93A (1978) 114 - 137

C-10 Fröhlich, H.: Organization and Long Range Selective Intersction in Biological and other Pumped Systems,
in [A-20] Seite 241 - 245

C-11 Fromm, H.: Simulierungen von Reaktions-Diffusions-Systemen mit mehrfachen Steady States

C-12 Gavalas, G. R.: Nonlinear Differential Equations of Chemically Reacting Systems, Springer-Verlag 1968

C-13 Geiseler, W. & Föllner, H. H.: Three Steady State Situation

in an Open chemical Reaction System 1
Biophys. Chem. 6 (1977) 107 - 115

C-14 Gierer, A. & Meinhardt, H.: A Theory of Biological Pattern Formation, Kybernetik 2 (1972) 30 - 39

C-15 Hoffman, D.: Simulierungen von Reaktions-Diffusions-Systemen mit mehrfachen Steady States

C-16 Janz, R. D. et al: Composite double Oscillation in a modified version of the Oregonator Model of the Belusov-Zhabotinsky Reaction, J. Chem. Phys. 73 (1980) 3132 - 3138

C-17 Light, J. C.: Phase Space Theory of Chemical Kinetics J. Chem. Phys. 40 (1964) 3221 - 3229

C-18 Mäkilä, P. M. & Walter, R. V.: The Energy Balance in Modelling Gas-Phase Chemical Reactor Dynamics
Chem. Eng. Sci. 36 (1981) 643 - 652

C-19 Mbaeyi, P. N. O.: Mathematical Models of Stably Evolving Complexities: Ia - Growth and Development as (m-n) Species Diffusion Problems, Prerint 1979; (revidierte, erweiterte Aufarbeitung unter dem Titel 'Nonlinear Field Theory of Measurable Energy-Matter Aggregations')

C-20 Nicholis, G. & Prigogine, I.: Self-Organization in Noneq-uilibrium Systems (From Dissipative Structure to Order through Fluctuations), John Wiley 1977

C-21 Sirota, N. N.: Heats of Formation and Temperatures and Heats of Fusion of Compounds $A^{III}B^{V}$, in [A-68] , 35 - 162

C-22 Thore, P.: Elaboration et Critique de Modeles Mathematiques et Numeriques de Tarissement par Evaporation - Application aux sols des Zones Arides, Dissertation Toulouse 1976

C-23 Tuckwell, H. C.: Solitons in Reactions-Diffusion Systems Science 205 (1979) 493 - 495

C-24 Veverka, V. & Madron, F.: Differential and integral Energy Balances of Complex Chemically Reacting Systems
Chem. Eng. Sci. 36 (1981) 825 - 832

C-25 Wanner, G. H.: The Threshold Law for Single Ionization of Atoms or Ions by Electrons, Phys. Rev. 90 (1953) 817 - 825

C-26 Wigner, E. P.: On the Behavior of Cross-Sections near Threholds, Phys. Rev. 73 (1948) 1001 - 1009

C-27 Winfree, A. T.: Wavelike Activity in Biological and Chemical Media; In: Mathematical Priblems in Biology, Lecture Notes in Biomathematics vol. 2 Seite 241 - 259
Springer-Verlag 1974.

D. Über Transportkoeffizienten und Raumeffekte in Diffusionsprozessen:

D-1 Adkins, J. E.: Nonlinear Diffusion: I - Diffusion and Flow of Mixtures of Fluids, Phil. Trans. Royal Soc. London A 255 (1962/63) 607

D-2 Allnatt, A. R. & Chadwick, A. V.: Therma Diffusion in Crystalline Solids, Chem. Rev. 67 (1967) 681 - 705

D-3 Amdur, I.: Viscosity and Diffusion Coefficients of Atomic Hydrogen & Atomic Deuterium, J. Chem. Phys. 4 (1936) 339

D-4 Amdur, I. & Shatzki, T.I.: Diffusion Coefficients of the Systems Xe-Xe and A-Xe, J. Chem. Phys. 27 (1957) 1049-1054

D-5 Baldwin, R. L. et al: Interacting Flows in Liquid Diffusion - Equations for Evaluation of the Diffusion Coefficients from Moments of the Refractive Index J. Chem. Phys. 77 (1955) 5235 - 5238 - 5249

D-6 Barnes, R. L & Silverman S.: Brownian Motion as a Natural Limit to all Measuring Processes, Rev. Mod. Phys. 6 (1934)

D-7 Battino, R.: Volume Changes on Mixing for Binary Mixtures of Liquids, Chem. Rev. 71 (1971) 5 - 45

D-8 Bendt, P. J.: Measurments of He^3-He^4 and H_2-D_2 Diffusion Coefficients, Phys. Rev. 110 (1958) 85 - 89

D-9 Bernasconi, C. F.: Relaxation Kinetics, Academic Press 1976

D-10 Bird, R. B. et al: Transport Phenomena, Wiley 1960

D-11 Boon, Y. P. & Yip, S.: Molecular Hydrodynamics, McGraw 1980

D-12 Boyd, R. K.: Macroscopic and Microscopic Restriction on Chemical Kinetics, Chem. Rev. 77 (1977) 93 - 119

D-13 Brown, W. B.: Phil. Trans. A250 (1957) 175, 221

D-14 Cardona et al: siehe [A-6] und [A-38]

D-15 Cova, D. R. & Drickamer, H. G.: The Effect of Pressure on Diffusion of Liquid Sulfur, J. Chem. Phys 21 (1955) 1364-

D-16 Creeth, J. M.: Studies of Free Diffusion in Liquids with the Rayleigh Method - I: The Determination of Differential Diffusion Coefficients in Concentration-Dependent Systems of Two Components, J. Chem. Phys. 77 (1955) 6429-6440

D-17 Cuddeback, R. B.: The Effect of Pressure on Diffusion in ..... Solutions, J. Chem. Phys. 21 (1953) 589-597-601

D-18 Czerlinski, G.: Chemical Relaxations, Marcel Dekker 1966

D-19 Doane, E. P. & Drickame, H. G.: The Effect of Pressure on Diffusion in the System CCl_4-SnI_4, J. Chem. Phys. 21 (1953)

D-20 Dreyer, G. et al: Grundlagen der Anwendung einer neuen

Diffusionsmethode in flüssiger Phasé: Die Steigerung des Diffusionstransports durch Pulsationsdiffusion
Z. Naturforschung 23a (1968) 498-503 & 883 - 886

D-21 Eu, B. C.: Cluster Expansion and Autocorrelation Functions: Self-Diffusion Coefficient, J. Chem. Phys. 55 (1971) 4613

D-22 Fujita, H.: The Analytical Solution of the Fick Equation with a Concentration Dependent Diffusion Coefficient in One Dimension having Infinite Vessel Limits
J. Colloid Sci. 9 (1954) 269 - 280

D-23 Fujita, H. & Gosting, L. J.: An exact Solution of the Equations for Free Diffusion in Three Component System with Interacting Flows and Its Use in the Evaluation of Diffusion Coefficients, J. Chem. Phys. 78 (1956) 1099 - 1106

D-24 Fuller, R. G. et al: Ion Transport in Potasium Chloride Phys. Rev. 176 (1968) 1036 - 1045

D-25 Gaube, J. & Koenen, E.: Temperaturabhängigkeit des Aktivitätskoeffizienten, Chem. Ing. Tech 51 (1979) 496-497

D-26 Gillis, J. & Kedem, O.: Free Diffusion with Coefficient Dependent on Concentration, J. Polymer Sci. 11 (1955) 545

D-27 Hefferich, F.: Ion Exchange, McGraw-Hill 1962

D-28 Heyne, L.: Electrochemistry of Mixed Ionic-Electronic Conductors; In: S. Geller (Ed.) 'Solid Electrolytes' Springer-Verlag 1977, Seite 169 - 221

D-29 Hiromi, K.: Kinetics of Fast Enzyme Reactions, Wiley 1979

D-30 Hockney, R. W. et al: Two Dimensional Particle Models in Semiconductor Device Analysis, Electronics Letters Vol. 10, Nr. 23 (1974) 484 - 486

D-31 Innes, K. K. & Albright, L. F.: Einfluß von Temperatur und Volumen des Gebietes auf Diffusionskoeffizienten
Ind. Eng. Chem. 49 (1967) 1793

D-32 Jeffries, O. R. & Drickamer, H. G.: Diffusion of System CH_4-TCH_3 to 300 Atmospheres Pressure
J. Chem. Phys. 21 (1953) 1358

D-33 Jost, W. & Hauffe, K.: Diffusion - Methoden der Messung und Anwendung, Dr. Dietrich Steinkopf Verlag Darmstadt 1972

D-34 Jost, W.: Diffusion und chemische Reaktion in festen Stoffen, Dresden und Leipzig 1937

D-35 Jost, W.: Grundlagen der Diffusionsprozesse,
Angewandte Chemie 76 (1964) 473

D-36 Jost, W.: Diffusion in Solids, Liquids, Gases,

D-37 Kahring, E. et al: Zur Kooplung von Diffusionsströmen in ternären Systemen bei Einsatz der Tracer-Methodik Monatsber. Deutsch. Akad. Wiss (Berlin) 12 (1970) 371-374

D-38 Katz, J.: Chemical Kinetics in Finite Volumes, Vortrag am 4.5.81 am Lehrstuhl f. Theor. Chemie, Tübingen

D-39 Kendall, D. L.: Diffusion, in [A-68] Seite 163 - 259

D-40 Kikuchi, R.: Substitutional Diffusion in Ordered Systems J. Chem. Phys. 51 (1969) 161 - 181

D-41 Lakshminarayanaiah, N.: Transport Phenomena in Artificial Membranes, Chem. Rev. 65 (1965) 491 - 565

D-42 Lamm, O.: Studies in the Kinematics of Isothermal Diffusion - A Macro-Dynamic Theory of Multi-Component Fluid Diffusion, Adv. Chem. Phys. 6 (1964) 291 - 313

D-43 Longuet-Higgins, H. C.: Proc. Roy. Soc. A205 (1951) 247

D-44 Mason, E. A.: Higher Approximations for the Transport Properties of Binary Gas Mixtures, J. Chem. Phys. 27 (1957) 75 - 84 und 784 - 789

D-45 Mazur, P.: Fluctuating Hydrodynamics and Renormalizations of Susceptibilities and Transport Coefficients; In: Transport Phenomena (Kuczenov & Marro Eds.) Springer 1974

D-46 Razi-Naqvi, K.: Diffusion-Controlled Reactions in Two-Dimensional Fluids - Discussion of Lateral Diffusion in Lipids in Biological Membranes, Chem. Phys. Letters vol. 28 No. 2 (1974) 280 - 284

D-47 Rowlinson, J. S.: Liquids and Liquid Mixtures, 1959

D-48 Saxton, R. L. & Drickamer, H. G.: Diffusion in Sulfur J. Chem. Phys. 21 (1953) 1362 - 1363

D-49 Savageau, M. A.: Biochemical Systems Analysis - A Study of Function & Design in Molecular Biology, Addison-Wesley 1976

D-50 Shewmon, P. G.: Diffusion in Solids, McGraw-Hill 1963

D-51 Stern, K. H.: The Liesegang Phenomenon Chem. Rev. 54 (1964) 79 - 99

D-52 Strehlow, H. & Knoche, W.: Fundamentals of Chemical Relaxations, Verlag Chemie 1977

D-53 Sundheim, B.R.: Transport Processes in Multi-Component Liquids, J. Chem. Phys. 27 (1957) 791 - 795

D-54 Thusius, D.: Chemical Relaxations in Molecular Biology; In: I Pecht & R. Rigler (Eds), Springer-Verlag 1977, S. 339

D-55 Völkl & Alefeld: Diffusion of Hydrogen in Metals; Kap. 12 von 'Hydrogen in Metals I' (Alefeld & Völkl, eds.) Springer

Verlag 1978, Seite 321 - 347

D-56 Winkelmann, A.: Über die Diffusion naszierenden Wasserstoffs durch Eisen, Ann. Phys. (Leipzig) 17 (1905) 589-626

D-57 Wise, H.: Diffusion Coefficients of Atomic Hydrogen through Multi-Component Mixtures

E. Über Laser und Informationsverarbeitung mit CTD:

E-1 Abraham, G.: Multiple-Valued Negative Resistance Integrated Circuits, in [E-5], Seite 420 - 472

E-2 Airey, J. R.: Cl + HBr. Pulsed chemical Laser - A Theoretical and Experimental Study, J. Chem. Phys. 52 (1970) 156-167

E-3 Arnold, S. J. et al: A Purely Chemical HCl Laser in E-21

E-4 Barbe, D. F.: Imaging Devices Using Charge-Coupled Concept Proc. IEEE 63 (1975) 38 - 67

E-5 Barbe, D. F. (Ed.): Charge Coupled Devices Springer

E-6 Barbe, D. F. et al: Signal Processing with Charge-Coupled Devices, in E-5 Seite 91 - 145

E-7 Ben-Shaul, A. et al: Lasers and Chemical Change, Springer Series in Chemical Physics, Springer-Verlag 1981

E-8 Ben-Shaul, A. et al: Statistical and Dynamical Models of Population Inversion, in [E-21], Seite 579 - 617

E-9 Brodersen, R. W. & White R. M.: New Technologies for Signal Processing, in A-1 Seite 172 - 178

E-10 Bullis, R. H.: Applications of Lasers Adv. Chem. Phys. 28 (1976) 423 - 465

E-11 Chester, A. N.: Chemical Lasers - A Survey of Current Research, Proc. IEEE 61 (1973) 414 - 422

E-12 Cohen, N. & Bott, J. F.: Kinetics of Hydrogen-Halide Chemical Lasers, in [E-21] Seite 33 - 94

E-13 Collet, M. G. & Esser, L. J. M.: Charge Transfer Devices Festkörperprobleme 13 (1973) 337 - 358

E-14 Cool, A.: Transfer Chemical Lasers, in [E-21] 431 - 467

E-15 Danielmeyer, H. G.: Stoichiometric Laser Materials Festkörperprobleme 15 (1975) 253 - 277

E-16 Dauel, P. J.: Control of Luminesence by Charge Extraction Phys. Rev. 111 (1958) 1240 - 1244

E-17 Destriau, G.: Der Gedächtniseffekt bei der Verstärkung der Lumineszenz durch elektrische Felder Z. für Physik 150 (1958) 447 - 455

E-18 Emmanuel, G.: Numerical Modelling of Chemical Lasers, in [E- 21] Seite 469 - 549

E-19 Farrington, G. C. & Briant, J. L.: Fast Ionic Transport in Solids, Science 204 (1979) 1371 - 1379

E-20 Fox, J. (ed.): Optical and Acoustic Micro-Electronics Microwave Research Inst. Symposia Series Vol. 23, 1974

E-21 Gross, R. W. F. & Bott, J. F.: Handbook of Chemical Lasers Wiley 1976

E-22 Goetzberger, A. & Schulz, M.: Fundamentals of MOS Technology, Festkörperprobleme 13 (1973) 309 - 336

E-23 Hochman, H-J.: The Art of Building LSIs IEEE Spectrum September 1969 29 - 36

E-24 Hockney, R. W. et al = D-30

E-25 Hofland R. & Mirels H.: Flame-Sheet Analysis of CW Diffusion-type Chemical Lasers: I - Uncoupled Radiation, II-Coupled Radiation AIAA 10 (1972) 420 und 1271

E-26 Howell, B. J.: Optical analog Computers J. Opt. Soc. Amer. 49 (1959) 1012 - 1021

E-27 Huelsman, L. P.: The Distributed Lumped active Network IEEE Spectrum August 1969 51 - 58

E-28 Jacobowitz, H.: Electronic Computers (A Made Simple Book), Doubleday & Company, Inc, New York 1963

E-29 Jensen, R. J.: Metal-Atom Oxidation Laser In [E-21] Seite 703 - 732

E-30 Karady, G.: High-Power Electronic Devices Adv. Electronics & Electr. Physics 41 (1976) 311 - 370

E-31 Kazan, B. & Nicoll, F. H.: Solid State Light Amplifiers J. Opt. Soc. Amer. 47 (1957) 887 - 894

E-32 Kelly, J.: Recent Advances in Electron Beam Addressed Memories, Adv. Electronics & Electr. Phys 43 (1977) 43 - 138

E-33 Keyes, R. W.: Physical Limits in Digital Electronics Proc. IEEE 63 (1975) 740 - 767

E-34 Köpf, U.: Laser in der Chemie, Verlag Sauerländer 1979

E-35 Kompa, K. L.: Chemical Lasers, Fortschritte der Chemischen Forschung, Springer-Verlag 1973

E-36 Lempicki, A. & Samelson, H.: Liquid Lasers Scientific American 216 (1967) 81 - 90

E-37 Lengyel, B.A.: Lasers, Wiley 1962

E-38 Levine, A. K. et al: Lasers 1 (1966) ff

E-39 Middeelhoek, S. et al: Physics of Memory Devices Academic Press 1976

E-40 Miller, S. E.: Photons in Fibers for Telecommunications in [A-1] Seite 167 - 172

E-41 Moore, C. B.: Lasers in Chemistry
Ann. Rev. Phys. Chem. 22 (1971) 387 - 429

E-42 Morehead Jr., F. F.: Light-Emitting Semiconductors
Scientific American 216 (1967) 108 - 122

E-43 Motsch, W: Halbleiterspeicher - Technik, Organization und Anwendung, BI Mannheim 1978

E-44 Mueller, R.: Grundlagen der Halbleiter-Elektronik
Springer-Verlag 1971

E-45 Nishizawa, J. & Otsuka, A.: Focusing -Type Integrated Optics, in [E-20] Seite 251 - 262

E-46 Nussenzweig, H. M.: Introduction to Quantum Optics

E-47 Peng, S. T. & Tamir, T.: Effects of Grove Profile on the Performance of Dielectric Grating Couplers, in [E-20] 377

E-48 Pimentel G. C. & Kompa, K. L.: What is a chemical Laser ? in [E-21] Seite 1 - 31

E-49 Rajchman, A. J.: New Memory Technologies, in [A-1] 179-185

E-50 Rine, D. (Ed.): Computer Science and Multiple-Valued Logic - Theory and Applications, North-Holland 1977

E-51 Schäfer, F. P.: Principles of Dye Lasers

E-52 Schulman, J. H. & Compton, W. D.: Color Centers in Solids
Pergamon Press 1963

E-53 Schwarz, M. et al: Communication Systems and Techniques
McGraw-Hill 1966

E-54 Sergent III, M. et al: Laser Physics, Addison-Wesley 1974

E-55 Shank, C. V.: Thin Film Distributed Feedback Lasers
in E-20 Seite 529 - 533

E-56 Shank, C. V.: Physics of Dye Lasers,
Rev. Mod. Phys. 147 (1975) 649 - 657

E-57 Snavely, B. B.: Continuous Wave Dye Lasers

E-57 Steckl, A. J. et al: Applications of Charge-Coupled Devices to Infrared Detection and Imaging
Proc. IEEE 63 (1975) 67 - 74

E-58 Steele, E. L.: Optical Lasers in Electronics, Wiley 1968

E-59 Svelto, O.: Principles of Lasers, Heyden London

E-60 Sze, S. M.: Physics of Semiconductor Devices, Wiley 1969

E-61 Ulrich, R.: Modes of Propagation on an open Periodic Waveguide for the far Infrared, in [E-20] Seite 359 - 376

E-62 Unger, H. G. & Harth, W.: Physics and Applications of MIS

Varactors, Adv. Elect. & Electr. Phys. 34 (1973) 281-346

E-63 Valasz, L. Z. et al: Silicon-Gate Technology IEEE Spectrum October 1969 19 - 35

E-64 Verwey, J. F.: Nonvolatile Semiconductor Memories Adv. Electronics & Electron Phys. 41 (1976) 249 - 309

E-65 West, M. E. (Ed.): Lasers in Chemistry, Elsevier 1977

E-66 Whitehouse, H. J.: Optical and Acoustic Signal Processing in [E-20] Seite 39 - 56

E-67 Yariv, A. & Gordon, J. P.: The Laser Proc. IEEE (Jan/1963) 4 - 29

E-68 Zeller, H. R.: Electronic Peoperties of One-Dimensional Solid State Systems, Feskörperprobleme 1973 31 - 58

E-69 Zewail, A. H. (Ed.): Advances in Laser Chemistry, Proc. Cof. Adv. Laser Chemistry, Pasadena 1978, Springer 1978

F. Über Differential- und Operatorengleichungen:

F-1 Barbashin, E. A.: Introduction to Stability Theory

F-2 Bihari, J. A.: A Generalization of a Lemma of Bellman and its Application to Uniqueness Problems of Differential Equations, Acta Math. Acad. Scient. Hung VII,1 (1956) 81-94

F-3 Bluman, G. W. & Cole, J. D.: Similarity Methods for Differential Equations, Springer Verlag 1974

F-4 Coddington E. A. & Levinson, N.: Theory of Ordinary Differential Equations, McGraw-Hill 1955

F-5 Daleckii, J. L. & Krein, S. G.: Stability of Solutions of Differential Equations, Amer. Math. Soc. 1974

F-6 Demidovich, B. P.: Lectures on Mathematical Theory of Stability, 1967

F-7 Friedman, B.: Principles and Techniques of Applied Mathematics, John Wiley 1966

F-8 Gelfand, I. M. & Formin, S. V.: The Calculus of Variations, Prentice-Hall 1963

F-9 Hahn, H.: Zum Problem der Praktischen Stabilität, Bericht (No. 56/1976) des Math.-Statistischen Sektion des Forschungszentrums Graz 1977

F-10 Ince, E. L.: Ordinary Differential Equations, Dover 1965

F-11 Kopell, N. & Howard, L. N.: Plane Wave Solutions to Reaction-Diffusion Equations, Studies Appl. Math 52 (1973) 291

F-12 Krasnoselskii, M. A. et al: Approximate Solution of Operator Equations, Wolters-Noordhoff Publ. 1972

F-13 Kurpel, N. S: Projection-Iterative Methods for Solutions of Operator Equations, Amer. Math. Soc. Transl. 1968

F-14 Lakshmikantham, V. & Leela, S.: Differential and Integral Inequalities, Vols. 1& 2, Academic Press 1969/1970

F-15 Leibovich, S. & Seebass, A. R.: Nonlinear Waves 1974

F-16 Malkin, I. G.: Theorie der Stabilität einer Bewegung Akademie-Verlag, Berlin 1959

F-17 Marchuk, G. I.: Methods of Numerical Mathematics 1975

F-18 Markus, L.: Structurall Stable Differential Systems Annals of Maths. 73 (1961) 1 - 19

F-19 Marsden, J. E. & McCracken, M.: The Hopf Bifurcation Theory and Its Applications, Springer 1976

F-20 Mbaeyi, P. N. O.: Numerical Perturbation Methods for Degenerate Nonlinear Systems (Abstract submitted to SIAM Conf. on Applied Linear Algebra)

F-21 Mitropolskii, J. A. & Bogoljubov, N. N.: Asymptotische Methoden in der Theorie der nichtlinearen Schwingungen Akademie-Verlag 1965

F-22 Nemytskii, V. V. & Stepanov, V. V.: Qualitative Theory of Differential Equations, Princeton Univ. Press 1960

F-23 Simmons, G. F.: Introduction to Topology and Modern Analysis, McGraw-Hill 1963

F-24 Smithies, F.: Integral Equations, Cambridge Univ. Press

F-25 Urabe, M.: Applications of Majorized Group of Transformations to Functional Equations, J. Science Hiroshima Univ 1952 267 - 283

F-26 Willems, J. C.: Dissipative Dynamical Systems - Part 1: General Theory, Arch Rat Mech. Anal. 45 321 - 351

G. Über Orthogonale Funktionen in der Numerik nichtlinearen Systeme und Informationsverarbeitung

G-1 Apostol, T. M.: Some Explicit Formulas for the Exponential Matrix, Amer. Math. Monthly 76 (1969) 289 - 292

G-2 Barker, V. A. (Ed.): Sparse Matrix Techniques, Springer 1977

G-3 Carroll, A. B. & Wetterald, R. T.: Application of Parallel Processing to Numerical Weather Prediction
J. Assoc. Computing Machinery 14 (1967) 591 - 614

G-4 Chambers, L. G.: Integral Equations - A Short Course International Textbook Company

G-5 Clenshaw, C. W. et al: Alogrithms for Special Functions

Num. Math. 4 (1963) 403 - 419

G-6 Delves, L. M. & Walsh, J.: Numerical Solution of Integral Equations, Oxford University Press 1974

G-7 Duijvestijn, A.J.W & Dekkers, A. J.: Chebycheff Approximations of some transcendetal Functions for use in digital Computing, Philips Res. Rpts. 16 (1961) 145 - 174

G-8 Elliot, D.: The Evaluation and Estimation of the Coefficients in the Chebycheff Series Expansions of a Function Math. Comput. 18 (1964) 274 - 284

G-9 Fox, L. & Parker, B.: Chebycheff Polynomials in Numerical Analysis, Oxford University Press 1968

G-10 Fraser, W.: A Survey of Methods of Computing Minimax and near minimax Polynomial Approximations for Functions of a single independent Variable, J. ACM 12 (1965) 295-314

G-11 Fröberg, C. E.: Rational Chebycheff Approximations of Elementary Functions, BIT 1 (1961) 256 - 262

G-12 Gröbner, W. & Knapp, H.: Contributions to the Method of Lie Series, BI Taschenbuch 1967

G-13 Harmuth, H. F.: Applications of Walsh Functions in Communications, IEEE Spectrum (11/1969) 82 - 91

G-14 Hurwitz, A. & Courant, R.: Vorlesungen über allgemeine Funtionentheorie und Elliptische Funtionen, Springer 1964

G-15 Kantorovich, L.V. & Kyrylov, V.I.: Näherungsmethode der Höheren Analysis

G-16 Mbaeyi, P. N. O.: Computational Modelling of Nonlinear Phenomena, Vortrag, 3rd Inter. Cof. Math. Modeling 1981

G-17 Michlin, S. G.: Numerische Realisierung von Variationsmethoden, Akademie-Verlag, Berlin 1969

G-18 Michlin, S. G.: Integral Equations, Pergamon Press 1964

G-19 McBride, E. B.: Obtaining Generating Functions, 1971

G-20 Noble, B.: Numerical Methods I, Oliver & Boyd 1966

G-21 Norton, H. J.: The Iterative Solution of Nonlinear Ordinary Differential Equations in Chebycheff Series Computer J. 7 (1964 - 65) 76 - 85

G-22 Oden, J. T. & Reddy, J. N.: An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements, Wiley 1976

G-23 Rivlin, T. J.: The Chebychev Polynomials, Wiley 1974

G-24 Smith, B. T. et al: Matrix Eigensystem - Routines - EISPACK Guide, Springer Verlag 1976

G-25 Urabe, M.: Numerical Determination of Periodic Solutions

of Nonlinear Systems,
J. Science Hiroshima Univ. Ser. A 20 (1957) 125 - 148

G-26 Urabe, M.: Nonlinear Autonomous System - Analytic Theory Academic Press 1967

G-27 Urabe, M.: On Centers of Higher Dimensions
J. Science Hiroshima Univ. Ser. A 19 (1955) 87 - 100

G-28 Veidinger, L.: On the Numerical Determination of Best Approximation in the Chebychev Sense, Num. Math 2(1960) 99-105

G-29 Villadsen, J. & Michelson, M. L.: Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximations, 1978

G-30 Wozmakowski, H.: Numerical Stability of the Chebychev Method for the Solution of Large Linear Systems
Num. Math 28 (1977) 191 - 209

N. Nachtrag:

N-1 Arechi, F. & Schulz-Dubois, E. O.: Laser Handbook, North Holland Publishing Coompany 1972

N-2 Baker, C. T. H.: The Numerical Solution of Integral Equations, Oxford University Press

N-3 Delves, L. M & Walsh, J.: Numerical Solution of Integral Equations, Clarendon Press, Oxford 1974

N-4 Bass, M. et al: Dye Lasers, Laser 3 (1971) 269 - 345

N-5 Cheo, P. K.: CO_2 Lasers, Laser 3 (1971) 111 - 268

N-6 Gerlach, W.: Thyristoren, Springer-Verlag 1979

N-7 Göhr, F. H.: Definitions of Electrochemical and Thermodynamic Terms and Their Relation to Semiconductor Parameters, In: Holmes, P. J. 'The Electrochemistr_y of Semiconductors' Academic Press 1962

N-8 Hamann, C. et al: Organische Leiter, Halbleiter und Photoleiter, Akademie-Verlag, Berlin 1980

N-9 Kalman, R. E. et al: Topics in Mathematical Systems Theory McGraw-Hill 1969

N-10 Leonhard, W.: Diskrete Regelungssystem, BI Taschenbuch 1972

N-11 Morse, P. M. & Feshbach, H.: Methods of Theoretical Physics Vol. 1 (pp 409 - 491), McGraw-Hill 1953

N-12 Oswald, W.: Zur Theorie der Liesegang'schen Ringe Kolloid. Z 36 (1925) 380 - 390

N-13 Petrovskii, I. G.: Partial Differential Equations, Iliffe Books, London 1967

N-14 Poincare, H.: Les methodes nouvelles de la mechanique

celeste

N-15 Pogorzelski, W.: Integral Equations and their Applications, Vol. 1, Pergamon Press 1966

N-16 Sagan, H.: Introduction ot Calculus of Variations McGraw-Hill 1969

N-17 Schäfer, F. P. Ed.): Dye Lasers, Springer-Verlag 1973

N-18 Schäfer, F. P.: Liquid Lasers, in [N-1] Seite 369

N-19 Schlitt, H. & Dittrich, F.: Statistische Methoden der Regelungstechnik, BI Taschenbuch 1972

N-20 Weber, H. & Herziger, G.: Laser - Grundlagen und Anwendungen, Physik Verlag 1972

N-21 Zubov, V. I.: Methods of A. M. Lyapunov and Their Applications, P. Noordhoff Ltd. Groningen 1964

N-22 Moore, W. J.: Der feste Zustand, Uni-Text 1977

N-23 Wyatt, J. L.: Network Representation of Reaction-Diffusion Systems far from Equilibrium, Computer Programs in Biomedicine 8 (1978) 180 - 195

N-24 Butterworth, R. C.: A set theoretical treatment of Coherent Systems, SIAM J. Appl. Math 24 (1972) 590 - 598

N-25 Wang, P. K. C.: Control of distributed Parameter Systems Adv. Control Systems (C. T. Leondes) 1 (1964) 75 - 172

N-26 Hirschfelder J. O. + Curtiss, C. F. + Bird, R. B.: Molecular Theory of Gases and Liquids (Wiley 1967)

N-27 Fife, P. C.: Branching Phenomena in Fluid Dynamics and Chemical Reaction Diffusion Theory, Centro Internationale Matematico Estivo (CIME), Edizioni Cremonese, Roma 1974

N-28 Leibovic S + Seebass A. R.: Nonlinear Waves, Cornell University Press 1974.

N-29 = N-11

N-30 Gurevich: Foundations of the Theory of Algebraic Invariants Noordhoff Groningen 1964

N-31 Gelfand und Formin: The Calculus of Variation Prentice-Hall 1963

N-32 Babuska + Prager, M. + Vitasek, E.: Numerical Processes in Differential Equations, Interscience Publishers 1966.

LEBENSLAUF

17.04.41	Geburtstag in Onitsha, Nigeria (als 2. Sohn von Chief Paul Ogidi Mbaeyi und Mrs Agnes Mbaeyi, geboren Oyinbo (†), Umuhu-Okabia, Orlu, Imo State, Nigeria).
1948 bis Ende 1959	Besuch von Volksschulen (in Onitsha) und Gymnasium (Government College Umuahia).
1962 bis Mitte 1963	Federal Science School, Lagos (für Londoner Universität 'A-Level')
1960, 1961 2. Häfte 1963 bis 8/65	Diverse Beschäftigungen: Bank (1960), Schulen (1961 und 7/63 bis 4/64), und Nigeria Airways (4/64 bis 8/65).
9/65 bis 6/66	Moskauer Universität.
9/66 - 9/72	Studium in der BRD: Abschluß: Diplom-Mathematik (der Universität Tübingen, Mai 1972) Hauptfach: Mathematik Nebenfach: Theoretische Physik
1973 bis 6/76	Forschungsaufenthalt in Großbritannien: Forschung in Bereichen der Steuerungstheorie (Randwertsteuerungen von Prozessen, die durch partiellen DGLen beschrieben werden), mathematische Biologie und Dynamik großer, komplexer Systeme.
9/74 - 12/74	Forschungsaufenthalt in Italien (in 'International Center for Theoretical Physics (ICTP)-UNESCO Forschungsveranstaltung über Steuerungstheorie, Funktionalanalyse und Dynamische Systeme).
10/76 bis heute	Forschung in Tübingen (Mathematik - Theoretische Chemie), unter Herrn Prof. Dr. F. F. Seelig am Lehrstuhl für Theoretische Chemie (seit 11/1977).

Meine akademischen Lehrer waren die Professoren und Dozenten:

- Brauner, Kneser, Lesky, Werner, Ziegler;
- Beckmann, Betsch, Fischer, Heil, Ibisch, Lenz, Locher, Meister, Reimer, Schäffer, Stumpff, Wielandt, Zeller;
- Burnside, Cnillingworth, Glen, Jones, Roach, Russell, Sleeman, Taylor;
- Krysinski, Lobry, Markus, Olech, Parks, Sell;
- Hahn, Rössler, Salzmann, Seelig, Tamaschke.

Publikationen: Seite 291-295.

A - 1/1979 ff

1979

1) Applications of Systems Theory Methodology: Vistas and Limitations
Paper delivered at Sympos. on Problems of Context, Amsterdam, April 1979. Will be published elsewhere; presently on depository terms with Inter. J. General Systems

2) Determination of Ultrastrucres in Diffusion Processes via Hierarchial Modelling
Paper delivered to Inter. Conf. Numerical Methods in Thermal Problems, University College, Swansea, UK July 1979
(Revised expanded form will appear in the jorunal ? 'Applied Mathematical Modelling')

3) Mathematical Models of Stably Evolving Complexities: II - General Forcing Terms of (m-n) Species Diffusion Problems
Abstracts, 2nd Inter. Conf. Math,. Modelling, Univ. of Missouri-Rolla, Missouri, USA

4) Mathematical Models of Stably Evolving Complexities IV - Mechanics of Unbounded Cell Division
Proc. 2nd Inter. Conf. Math. Modelling, vol. 2 841 - 850, University of Missouri-Rolla, Rolla, Missouri, USA

5) The Teachables and Non-Teachables of Mathematical Modelling
Proc. 2nd Inter. Vonf. Math, Modelling, vol. 2 699 - 708
University of Missouri-Rolla, Rolla, Missouri, USA

6) Basic Renewal Theory
Lecture, 2nd Yaounde Workshop on Math. Modelling in the Mathematical Sciences
(Appears as part of 'Nonlinear Field Theory of Energy-Matter Aggregations, its stochastic extensions, and also in socio-economic modelling)

7) Qualitative Problems of Models of Evolution
Lecture, 2nd Yaounde Workshop Math. Models in the Mathematical Sciences
(Will appear as part of 'Synthesis and Realization of Evolution Models', in preparation)

8) Forum on Network Theory and Design in Biomedical Systems
Health Commun. Informatics 193 (1979) 220 - 234
(Contents: Resources Management and Network Problems; Problems of Network Applications in Biomedical Diagnostics - The Need for Theoretical Reconsiderations)

9) Mathematical Models of Stably Evolving Complexities Ia - Growth and Development as (m-n) Species Diffusion Problems
Preprint; enlarged expanded edition scheduled to appear 1982 (autumn/winter) as 'Nonlinear Field Theory of Measurable Energy-Matter Aggregations' (in New York)

1980

1) Information Capacity of Neural Networks:I - Single Neurons and Basic Mathematical Model
To appear in Proc. 5th Europ. Meeting Cybernetics and Systems Research, Vienna

2) Time Optimal Control of Infinite Dimensional Systems
To appear, Proc. 5th Europ. Meeting Cybernetics & Systems Research, Vienna

3) Information Capacity of Neural Networks: II - One Dimensional Neural Network
To appear in Proc. Workshop Math. & Computer Methodologies in Biology and Medicine, University of Salerno, Italy, April 1980

4) The Role of Algebraic Education in Understanding Mathematical Applications
Poster Session, 4th Inter. Congress Math. Education, Berkeley 1980 (Will appear elsewhere)

5) Forum on Network Theory and Design in Biomedical Systems: ELEMENTARY INTRODUCTION TO DESIG CONCEPTS
(contents: (1) Mbaeyi - editorial - 'Biomedical Equivalents of Basic Network Concepts
(2) Tsoi - 'Network Synthesis, Classical and Modern Approach')
Will appear as part of a series on 'Oncological Studies' by a New York based International Foundation for Bio-Social Health

6) Stress as a Factor of Human Evolution
To appear in the series on 'Oncological Studies' of a New York based International Foundation for Bio-Social Health

1981

1) Basic Concepts of Neural Networks and Perception Theory (an invited paper)
2) Analytic Membrane Theory
3) Some Practical Guides through the Labryniths of Mathematical Modelling
4) Equivalence of N-dimensional Lattices and many N-Body Problems via Hierarchial Modelling
5) Computational Modelling of Nonlinear Phenomena

- all five in 'Book of Abstracts' 3rd Inter. Conf. Math. Modelling, University of Missouri-Rolla, Rolla/Missouri (at Los Angeles, July 29 - 31 1981)
Will appear in 'International Journal on Math. Modelling'.

PAPERS NOT ORALLY PRESENTED AT NAMED CONFERENCES, BUT IN PRE-CONFERENCE PUBLICATION OF PROCEEDINGS

1) When is Data Ensemble Sufficient for Reliability Predictions ?
Proc. 3rd National Reliability Conf., UK, April 1981

2) Hierarchial Models versus Finite Elements
Proc. Inter. Conf. Numerical Methods in Thermal Problems, Venice 1981

ACCEPTED CONFERENCE PAPERS, SUBMITTED ONLY AS ABSTRACTS (see 'Book of Abstracts' of named Conferences)

1) Parallel-Processing Models for Turbulence Prediction Problems
Inter. Conf. Numerical Methods in Laminar & Turbulent Flows, Venice 1981

2) Computational Algorithms for the Time Optimality Equations for Diffusion Processes
Inter. Conf. Num. Methods Thermal Problems, Venice 1981

3) Complete Autonomous Field Equations for Controlled Fusion Models
Spring School on Plasma Problems 1981, International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy

4) Towards Analytic Predictive Socio-Economic Models
Inter. Conf. Systems Science, Wroclaw, Poland, Sept. 1981

5) Elliptic Functions and Space-Time Structures of Reaction-Diffusion Processes
Conf. Rythms in Biology, Chemistry, Physics & Other Application Fields, CIRM, Marsilles, France, Sept. 1981

6) Time Concepts in Evolution (Observable and Intrinsic Time Classes
8th Inter. Congress Math. Biology, Sept 1981, Paris, France

7) Types of Transport Mechanics in Membranes
Post Session, 2nd Course on Structure of Membranes, Oct 1981, Trento, Italy

1982

1) The Many Faces of Memory: Alzernative Framework for Development of Memory Concepts
(Paper at 1982 6th European Meeting on Cybernetics & Systems Research, Austrian Association for Cybernetics, Vienna, April 1982 - see corresponding Book of Abstracts; full length paper will be published elsewhere in connection with development of 'Quantum Theory of Molecular Coding and Memory')

2) Flow Pattern for Models of Biological Membranes
Ann. New York Acad. Sci. vol 404 105 - 107 (1983)
(Proc. 4th Conf. Physico-Chemical Hydrodynamics)

3) Mobilities, Relaxabilities and Nonlinear Models of Atmospheric Dynamics
(Paper, 19th Annual Meeting Eng. Sciences Soc. America, Universit: of Missouri-Rolla, Rolla, October 1982; see corresponding Book of Abstracts. Full length paper will be submitted to Inter, J-Math. Modelling).

ACCEPTED CONFERENCE PAPERS IN PRINT ONLY AS ABSTRACT (see Book of Abstracts of Corresponding Conferences)

a) Numerical Perturbation Methods for Degenerate Nonlinear Systems
(SIAM April 1982 Conf. on Numerical Linear Algebra)

b) Numerical Solutions of PDEs and Functional Differential Equations
(SIAM Fall Conference 1982)

c) Parallel-Processing of Coupled Systems of Nonlinear PDEs
(SIAM-IEEE Conf on VLSI, Fall 1982)

1983

1) Migratory Birds: Path Finding Using Madar ? (Magnetic Detection and Ranging)
To appear 1984, Proc. in Life Sciences: Localization and Orientation in Biol. & Eng. Prof. Varju (Ed), Springer, Heidelberg.

a) Models of Path Finding by Migratory Birds Using ACEDAR with Applications to Geoscientific Problems
and
Model of a General Approximation Function

4th Inter. Conf. Math. Modelling Zürich 1983

b) Hierarchial Data Bases for Demographic Modelling and Analysis
(Inter. Conf. Data Bases, New Brunswick, NJ 1983)

B - 1971 - 12/1978 (in reverse yearly sequential order)

1978

1) On the Constructibility of Algebraic Systems Theory for Infinite Dimensional Control Dynamical Systems
Progress in Cybernetics & Systems Research vol 6 (Mathematical Systems Theory) pp 347 - 355

2) Mathematical Modelling in the Neural Sciences: Qualitative Systems Theoretical Approach
Afromatics vol 1 (1979) 87 - 121

1977

1) Model Construction for Cooperative Phenomena
'Book of Abstracts', 1st Inter. Conf. Math, Modelling, University of Missouri-Rolla, Rolla/Missouri, July 1977

2) Geometrical Structures as a Guide to Control Structures in Biological Systems
Revue de Bio-Mathematique 65 (1979) 23 - 38

3) δ-Null Steuerbarkeit unendlich dimensionaler Systeme
Austrian Mathematical Congress, Salzburg, Spet. 1977

4) Sources of Matnematics - An Investigation into the Nature, Need and Relevance of Mathematics in the Formulation and Analysis of Problems
Preprint; see publication projections under 'Works in Progress'

1976

1) On Parameterized Linear Systems II - Part 1 (Section 1): Mathematical Formulation of Linear Systems with Parameters (some basic foundations)
Preprint; (submitted, but returned, by IEEE Trans Man & Systems) Will appear elsewhere as part of 'Mathematical Models of Stably Evolving Complexities: XXI - Theoretical and Motivational Foundations of Hierarchial Modelling'

2) On Parameterized Linear Systems II - Part 1 (Section 2): Time Delays, Optimality, Control Coordination, Entropy and Reversibility in Biological Systems
Proc. 8th Inter. Congress Cybernetics 1978 815 - 825

3) On Parameterized Linear Systems II - Part 1(Section 3) - Modelling, Pattern Recognition, Probability and Observation of Systems
Proc. 8th Inter. Congress Cybernetics 1978 703 - 718

4) Operational Model to Distribute a Nation's Health Resources
Impact of Science on Society vol. 26 (1976) (UNESCO)
(special issue on 'Rational Use of Health Resources')

5) a) Art vs Technique in the Achievement of Goals and Objectives of Mathematics Educations ?
b) A Few Observations in respect of the Nature of Mathematics ...
Contributions, 3rd Inter. Congress Math. Education 1976

1975

1) Suggestions and Recommendations for Adavanced Courses on Systems Sciences as Integral Part of Programme of ITCP, Trieste, Italy

1974

1) Applications of Concepts of Dynamical Systems Theory
Seminar Notes, 1974 Autumn Mathematics Course, ICTP, Trieste

2) Editor: 'World Guide to Science, Vol. 8 - Austria/Switzerland
(For a publishing house in Huernsey, Channell Islands)

UNPUBLISHED WORKS (revised expanded versions are integral parts of some current works in progress)

1976

1) On Problems of (Higher) Education as seen from Similarities in Mathematics
Submitted for the 1976 Betrand Russell Memorial Logic Conference Essay Prize
Revised, enlarged edition as basis for 'A Cybernetical Study of (Mathematics) Education as Adaptive Processes'

1975

1) Controllability and Synthesis of Infinite Dimensional Systems
A Ph.D thesis, referred 1976

(All 7 major results of thesis appearing separately: 1980 - result on time optimality, 1978 - result on finite dimensionality of infinite dimensional systems, 1977 - δ-Null controllability result as foundation of controls on infinite dimensional spaces. Detailed elaboration of results scheduled as part of 'Synthesis and Realizations of Evolution Processes', section on time optimal controls of diffusion-driven processes in engineering, biology and medicine)

1974

1) Neutron Scattering and Bifurcation Theory
Contribution, Math. Physics Group (Prof. Tarski), ICTP, Trieste
(Integral part of 'Analytic Bifurcation Theory' in 'Nonlinear Mathematics', under preparation)

2) Spaces of Analytic Functions and Their Applications
Staff Seminar, Paisley

(Integral part of 'Nonlinear Mathematics' under preparation, - parallel processing computational models)

1973

1) Remarks on Goldwyn's paper with regard to possible Use of Concepts of Entire Function Spaces
Internal Report, Paisley
(Integral part to 'Nonlinear Mathematics', under preparation)

2) Survey of Equations of Nerve Pulse Transmission
Internal Report, Dundee
(Motivational survey underlying later and continued developments of neural mechanics and information capacity of neural networks - Mathematical Neurosciences)

1971

1) 'Die Trajektorien von autonomen Differentialgleichungen'
Diplomarbeit (Master's dissertation) University of Tuebingen